

スピン軌道結合格子における 弱局在の理論

早坂 太志

電気通信大学大学院 情報理工学研究科
博士(理学)の学位申請論文

2020年3月

スピン軌道結合格子における 弱局在の理論

博士論文審査委員会

主査	伏屋	雄紀	准教授
委員	大淵	泰司	准教授
委員	尾関	之康	教授
委員	小久保	伸人	准教授
委員	中村	淳	教授

著作権所有者

早坂 太志

2020 年

Weak localization in spin-orbit coupled lattice systems

Hiroshi Hayasaka

Abstract

The quantum correction to electrical conductivity is studied on the basis of two-dimensional Wolff Hamiltonian, which is an effective model for a spin-orbit coupled (SOC) lattice system. It is shown that weak anti-localization (WAL) arises in SOC lattices, although its mechanism and properties are different from the conventional WAL in normal metals with SOC impurities. The interband SOC effect induces the contribution from the interband singlet Cooperon, which plays a crucial role for WAL in the SOC lattice. It is also shown that there is a crossover from WAL to weak localization in SOC lattices when the Fermi energy or band gap changes. The implications of the present results to Bi-Sb alloys and PbTe under pressure are discussed.

スピン軌道結合格子における弱局在 の理論

早坂 太志

概要

スピン軌道結合 (spin-orbit coupling(SOC)) による不純物散乱は、二次元系において弱反局在 (WAL) を引き起こす。これは Hikami-Larkin-Nagaoka(HLN) 理論により説明される。HLN 理論は金属中の自由電子が SOC の強い不純物によってスピン緩和される効果を考慮している。このような系は例えば Cu 薄膜中に Au 原子が付加されたような状況であり、“希薄 SOC 系” とみなすことができる。近年、HLN らによって導かれた HLN 公式を用いたスピン緩和長の評価はスピントロニクスやトポロジカル物質の分野において重要性を増してきている。これらの分野で関心がもたれる物質は概して、結晶を構成する原子それ自体の SOC が強く、不純物 SOC は弱い。これは例えば Bi 薄膜のような系であり、“SOC 格子系” と解釈することができる。HLN 公式は、SOC 格子系も希薄 SOC 系と同様の枠組みで説明できるという仮定のもと、多くの SOC 格子系に適用されてきた。しかし HLN 公式を SOC 格子系に適用することの妥当性は不明確である。本研究では二次元 SOC 格子系において、量子

補正効果の計算を行い HLN 理論との差異を調べた。我々は SOC 格子系の有効模型である Wolff ハミルトニアンを用いた。Wolff ハミルトニアンはディラックハミルトニアンと数学的に等価な模型である。SOC 格子系において、フェルミエネルギーとバンドギャップの比によって WAL-弱局在 (WL) クロスオーバーが生じることを示した。SOC 格子系の WAL 領域において、希薄 SOC 系とは本質的な違いが現れることが明らかとなった。希薄 SOC 系では電気伝導度の磁場依存性に明確な極値が生じるのに対し、SOC 格子系では極値は生じない。HLN 理論では WAL が生じるためにはスピン緩和が起きる必要があった。しかし SOC 格子系ではスピン緩和散乱がなくても WAL が生じることが明らかになった。希薄 SOC 系ではバンド内の電子がスピン一重項を組んだバンド内一重項が WAL を与えるのに対して、SOC 格子系の非従来型の WAL には SOC のバンド間効果によるバンド間スピン一重項が寄与していることを示した。SOC 格子系である、Bi-Sb 合金と圧力下での PbTe における実験について議論をした。

目次

序論	1
第 1 章 スピン軌道結合格子系と有効模型	3
1.1 Bi の性質	3
1.2 PbTe の性質	5
1.3 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論と等方的 Wolff ハミルトニアン	8
1.3.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論	8
1.3.2 Wolff ハミルトニアンの導出	11
1.4 スピン緩和機構	15
1.4.1 Elliott-Yafet 機構	15
第 2 章 量子輸送理論	17
2.1 不純物散乱の効果と不純物平均	17
2.1.1 スピン軌道結合散乱の効果	21
2.2 電気伝導度の導出	23
2.3 アンダーソン局在と量子補正効果	24
2.4 量子補正効果の計算	26
2.4.1 スピン軌道結合効果がある場合の量子補正効果の計算	28
2.4.2 クーペロンの成分と拡散方程式	30
2.5 磁気伝導度に対する量子補正効果	33
2.6 その他の弱局在効果に関する理論	35
2.7 実験について	35
第 3 章 スピン軌道結合格子における弱反局在の理論	39
3.1 研究背景	39
3.2 伝導度に対する量子補正効果	40
3.3 WAL 領域における σ_W と σ_{HLN} の比較	48

3.4	WL 領域における σ_W と σ_{HLN} の比較	50
3.5	$\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ と PbTe における WL-WAL クロスオーバー	54
第 4 章	スピン軌道結合格子におけるスピン緩和長の評価	59
4.1	研究背景	59
4.2	不純物散乱と緩和時間	60
4.3	バーテックス補正	61
4.4	Bethe-Salpeter 方程式	64
4.4.1	$\hat{\Pi}$ の計算	67
4.4.2	$\hat{\Gamma}$ の計算	71
4.5	電気伝導度, および磁気伝導度に対する量子補正効果	72
4.6	スピン緩和長について	80
結論		83
付録 A	線形応答理論	85
付録 B	第 4 章の Γ の成分	90
謝辞		93
関連論文の印刷公表の方法および時期		96
参考文献		97

目次

1.1.1	Bi の結晶構造とブリルアンゾーン	4
1.1.2	Bi の電子状態	5
1.2.1	PbTe のバンド図	6
1.2.2	$\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の Sn のドーブ量に対する L 点のエネルギー変化	7
1.2.3	$\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の Sn のドーブ量に対する M の変化	8
2.1.1	不純物散乱の効果を表す既約ダイアグラム	18
2.1.2	最低次のボルン近似による不純物散乱を含んだグリーン関数	21
2.1.3	SOC を持った不純物散乱の効果を表すダイアグラム	22
2.2.1	電気伝導度に対応するダイアグラム	23
2.2.2	電流-電流相関関数に対する不純物平均	23
2.3.1	電子波の多重散乱を表す概略図	25
2.4.1	電気伝導度に対する局在の補正を表すダイアグラム	26
2.4.2	Bethe-Salpeter 方程式を表すダイアグラム	27
2.5.1	磁気伝導度の磁場依存性	34
2.7.1	Au を付加した Mg の磁気伝導度	36
2.7.2	Bi 薄膜における弱局在解析	37
3.1.1	希薄 SOC 系と SOC 格子系の概略図	40
3.2.1	電気伝導度に対する量子補正効果と Bethe-Salpeter 方程式のダイアグラム	42
3.2.2	量子補正効果に寄与しないダイアグラム	43
3.2.3	$\Delta\sigma_W(B)$ の磁場依存性	47
3.2.4	α_t と $-\alpha_s$ の $\lambda = E_F/\Delta$ 依存性	48
3.3.1	弱反局在領域における $\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)$ の磁場依存性	49
3.4.1	$\delta\sigma_W$ と $\delta\sigma_{W'}$ の規格化されたスピン緩和長 ℓ_t と ℓ_{so} の $\lambda = E_F/\Delta$ 依存性	50
3.4.2	弱局在領域における $\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)$ の磁場依存性	51

3.5.1	Bi の電子状態	55
3.5.2	$\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)$ の磁場依存性	56
3.5.3	PbTe における圧力による L 点近傍のエネルギー変化	57
4.2.1	$1/\tau$ の λ 依存性	61
4.3.1	バーテックス補正を表すダイアグラム	62
4.4.1	Bethe-Salpeter 方程式を表すダイアグラム	65
4.4.2	$\hat{\Gamma}$ の行列表示	73
4.5.1	電気伝導度の量子補正効果を表すダイアグラム	73
4.5.2	α_t と α_s の E_F/Δ 依存性.	78
4.5.3	η の E_F/Δ 依存性.	78
4.5.4	ℓ_s と ℓ_t の E_F/Δ 依存性.	79
4.5.5	電気伝導度の量子補正効果の磁場依存性	79
4.6.1	磁気伝導度の Wolff と HLN の比較	80

表目次

1	Bi において初めて発見された物理現象	3
2	HLN (希薄 SOC 系), Wolff (SOC 格子系) の Γ の成分.	54
3	クーパー不安定性をもつ Γ の成分.	76
4	SOC 格子系と HLN 理論で得られた緩和長	81
5	SOC 格子系におけるクーパー不安定性をもつ Γ の成分のまとめ.	84

序論

現代のエレクトロニクスにおいて、デバイスの動作性能の高速化、効率化、小型化を目指す際に障害となるのが電子輸送に伴い発生するジュール熱である。いかにジュール熱の発生を抑制し、情報を伝達できるかが固体物理学における重要課題の一つである。この問題を解決する一つの方策として、電子のもつスピン自由度を用いたスピントロニクスがある。スピンの流れであるスピン流は、電荷の移動を伴わないためジュール熱の発生を抑制できると期待されており、パラダイムの転換が起きる可能性がある。スピン流を生成する方法の一つにスピンホール効果がある。スピンホール効果とは電流と垂直方向にスピン流が流れる現象であり、理論的な提案ののち [27, 55, 82, 94]、近年ではその実験的な検証が進んでいる [61, 103]。しかし、実用化に至るためにはスピンと電流の変換効率はまだまだ低いのが現状であり、スピン-電流変換効率の高い物質の探索が日夜続けられている。その有力な候補としてスピン軌道結合効果が強いディラック電子系物質が注目されている。ディラック電子は相対論的量子論、すなわち高エネルギー物理学の文脈で登場する電子であるが [24]、固体中においてもその低エネルギー有効ハミルトニアンがディラック電子と同様の形をもつことがある。特に結晶のスピン軌道結合効果 (SOC) が強いときに現れるディラック電子系はスピン-電流変換効率が高い物質として有望視されており、数多くの研究が行われている [34, 35, 37, 46, 47, 56, 69, 92]。

情報の伝達という観点に立つと、スピンの到達可能距離、すなわちスピン緩和長はスピン-電流変換効率と同等に重要な要素である。スピン輸送においては散乱される際のスピン緩和が問題となる。スピン緩和長の有力な決定手法の一つとして、Hikami-Larkin-Nagaoka (HLN) の理論を用いた弱局在解析の手法がある [13]。

弱局在効果とは不純物散乱による電子の局在化に伴う、金属-絶縁体転移の前駆現象のことをいう。よく知られているように、スケーリング理論の結果によると二次元系では必ず局在が起きるとされるが [1]、SOC が存在する場合はその限りではない。SOC を考慮した量子補正効果の計算は HLN 理論によって行われた。この理論によると SOC が強くなると局在の効果が弱められる反局在効果が起きる。HLN 理論は結晶を組む原子の SOC は弱く、希薄に存在する不純物が強い SOC をもつ状況 (希薄 SOC 系) を想定している。一方スピントロ

ニクスにおいて注目されるのは、SOC が強い原子が格子を組み、SOC の弱い不純物が希薄に存在する状況 (SOC 格子系) である。HLN 理論は本来、希薄 SOC 系の理論であるにもかかわらず、SOC 格子系に対しても適用範囲を超えて利用されている。素朴に考えれば格子系は希薄系の反対側の極限であると考えることができる。これは SOC をもつ不純物濃度を増大させることに対応するが、HLN 理論の摂動的な取り扱いとは相容れない。また SOC 格子系の場合、結晶中のブロッホ電子のバンド、およびスピンの混成するバンド間効果が現れる。バンド間効果による反磁性効果、およびスピンホール効果は希薄 SOC 系の枠組みでは説明できない顕著な例である [45–47]。SOC 格子系においてスピン緩和長の正確な評価を行うには、バンド間の効果をも含んだ SOC 効果の非摂動的な取り扱いが必要である。

本研究の目的は、SOC 格子系における新たな弱局在公式を打ち立て、スピン緩和長の評価手法を確立することである。本博士論文の構成は以下のとおりである。第 1 章で SOC 格子系について概観し、SOC 格子系の解析に必要な $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論の概要を説明する。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を用いて SOC 格子系の低エネルギー有効ハミルトニアンである等方的 Wolff ハミルトニアンを導出する。第 2 章で不純物散乱の効果と、それによる電気伝導度に対する量子論的な補正の効果である、弱局在効果について説明する。また SOC 効果の入った弱局在理論である HLN 理論について説明する。第 3 章において SOC 格子系における弱局在効果に関する研究成果について説明する。SOC 格子系は従来の希薄 SOC 系とは異なり劇的な差異が生じるということについて重点的に議論した。第 4 章では量子補正効果に対してすべての状態遷移を取り入れた計算結果を示す。第 3 章の結果とは定性的には等しいものの定量的な差異が生じることを示す。またスピン緩和長について議論する。最後に本研究の結論をまとめた。線形応答理論および第 4 章の計算の補足は付録とした。

第1章 スピン軌道結合格子系と有効模型

本章では結晶のスピン軌道結合 (SOC) が強い, “SOC 格子系” について概観する. 典型的な SOC 格子系として Bi および PbTe が知られている. 両者は共にブリルアンゾーン (BZ) の L 点において狭いバンドギャップが開いた線形分散をもつ. この L 点のバンドギャップ近傍の電子状態に対する有効模型である, Wolff ハミルトニアン^[1]の導出について記す. また模型のエネルギー固有状態と対称性について議論する.

1.1 Bi の性質

Bi は物性物理研究の歴史において重要な位置を占めており, これまで多くの新規現象が見つかってきた物質である [47]. 表 1 にこれまで Bi で初めて見つかった現象をまとめる.

表 1 Bi において初めて発見された物理現象 (文献 [47] を参考に作成).

西暦	発見された現象
1778	反磁性効果
1821	ゼーベック効果
1886	ネルンスト効果
1928	磁気抵抗効果
1930	シュブニコフ=ド・ハース効果
1930	ド・ハース=アルフェン効果
1955	金属中のサイクロトロン共鳴
1963	磁気ひずみ振動

この特異な性質の鍵となるのが固体中のディラック電子である. 以下 Bi における諸性質を述べる.

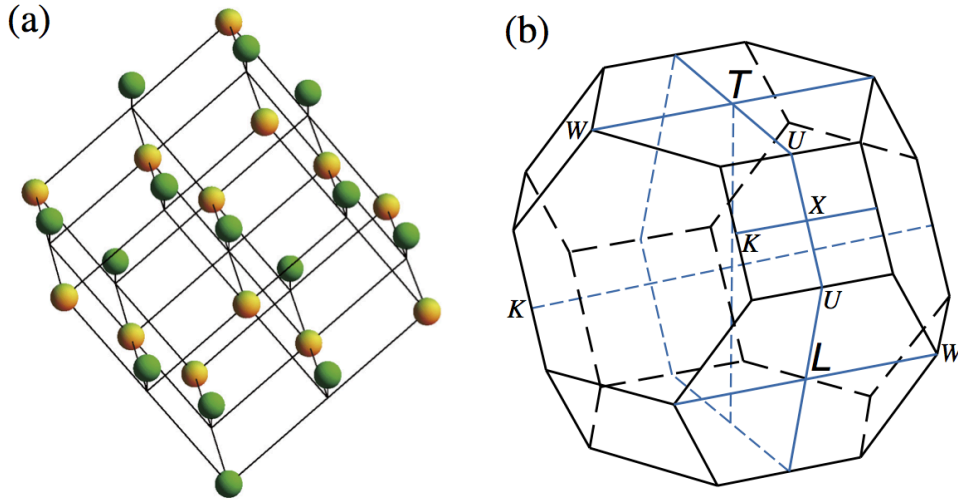


図 1.1.1 (a) Bi の結晶構造と (b) ブリルアンゾーン (文献 [47] より引用).

Bi の結晶構造は面心立方格子に対し $[111]$ 方向にわずかに変位が加わった、菱面体構造をとる．これにより L 点のバンドギャップが開き、電子は高い移動度、極めて小さい有効質量をもつ．単位胞には 2 つの原子があり、それぞれの原子あたり 5 つの価電子 (s^2p^3) が存在する．図 1.1.1 に Bi の結晶構造とブリルアンゾーン (BZ) を示した．結晶の歪みにより面心立方格子における L 点の対称性が落ち、図 1.1.1 のように 3 回対称軸を持った 2 つの T 点と 4 つの L 点があられる．図 1.1.2 は Bi の電子状態である．キャリアは電子とホールがそれぞれ L 点と T 点に位置し、 L 点においてはディラック電子が実現しているとされる [108]．また L 点におけるバンドギャップの大きさは 10meV 程度と非常に小さい．一方、Bi 原子のもつ SOC 効果の値は 1.8eV にも及び [110]、バンドギャップの値を優に上回る．

SOC が強いほど大きなスピンの流れが得られると期待されており [36]、そのため強い SOC をもつ Bi においてスピンホール効果に関する実験、理論研究が盛んに行われている [34, 35, 37, 46, 47, 56, 69, 92]．

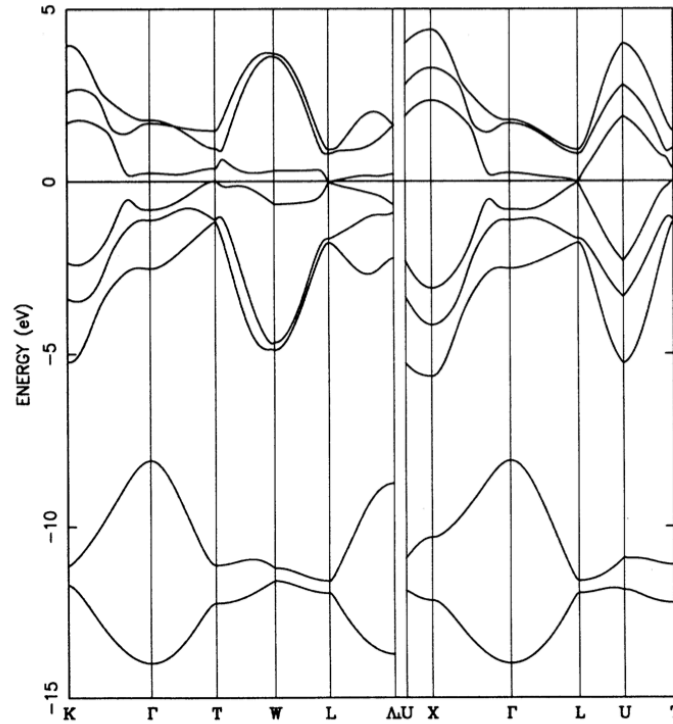


図 1.1.2 Bi の電子状態 (文献 [74] より引用).

1.2 PbTe の性質

PbTe は NaCl 型の結晶構造を有しその格子定数は 6.4\AA 程度である [72]. BZ は面心立方格子のものを取る. 図 1.2.1 に PbTe の電子状態を示す. PbTe は L 点において狭いバンドギャップを有する線形分散を有することが分かる. シュブニコフ＝ド・ハース振動 (SdH), およびド・ハース＝ファン・アルフェン振動の実験により L 点の電子ポケットの構造が詳細に調べられている [16,98]. Burke らの SdH の実験では, SdH の振動数スペクトルが等エネルギー面の極値断面積と関係していることを利用し, 等エネルギー面の構造, および有効質量が調べられた. 結果として $[111]$ 方向に平行に楕円体が伸びているような等エネルギー面が存在し, L 点における電子有効質量は $0.035\sim 0.072$ と見積もられた. 十分にホールドーピングされた場合, L 点の他に Σ 点の価電子バンドがフェルミ面近傍に現れる [95]. また温度を上昇させると 500K 程度で L 点と Σ 点のエネルギーが同程度になることからマルチバレー構造が実現し熱電変換に有利とされる [86].

PbTe と SnTe の混晶系 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ はバンド反転が見つかった最初の系として知られて

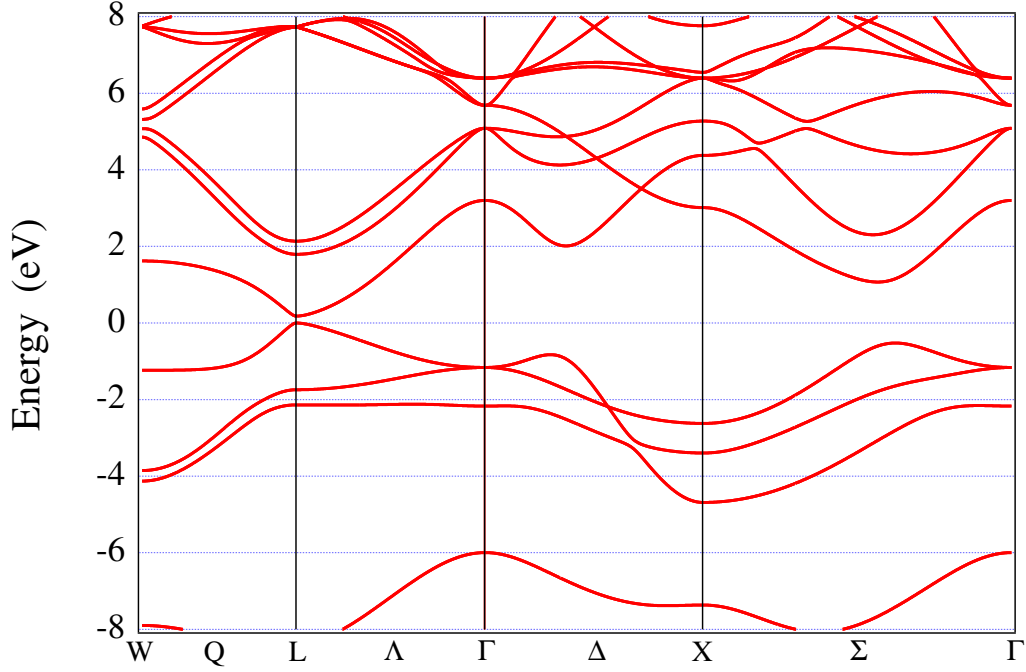


図 1.2.1 PbTe のバンド図. 文献 [72] を元に再計算した.

いる [23]. バンド反転とはある既約表現に属するエネルギーバンドの順序が入れ替わることをいう. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ においては $x = 0$ のとき, L 点における価電子帯, 伝導帯の既約表現はそれぞれ L_6^+ , L_6^- である. x を増大させていくと, ある値で価電子帯, 伝導帯の既約表現がそれぞれ L_6^-, L_6^+ となりバンドの順序が反転する. 図 1.2.2 は L 点における伝導帯と価電子帯のエネルギーの Sn ドープ量 x の依存性である. バンドの順序反転により, ミラーチャーン数と呼ばれるトポロジカルナンバーが非自明となるためにトポロジカル結晶絶縁体となる [41, 57]. Dziawa らの仮想結晶近似を用いた $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の薄膜のバンド計算によると, バンドの順序反転後に表面状態に質量ゼロのディラックコーンが現れ, トポロジカル結晶絶縁体となることを確認することができる [31].

注目するあるエネルギー領域における電子のふるまいが, ディラック電子的かどうかを判別する指標として, ゼーマンエネルギーとサイクロトロンエネルギーの比 M がある [47, 52]. ここでディラック電子的かどうか, すなわち “ディラック電子性” とは後の次節で説明する Wolff ハミルトニアンとの近さを意味する. Wolff ハミルトニアンの M は 1 であるため, M

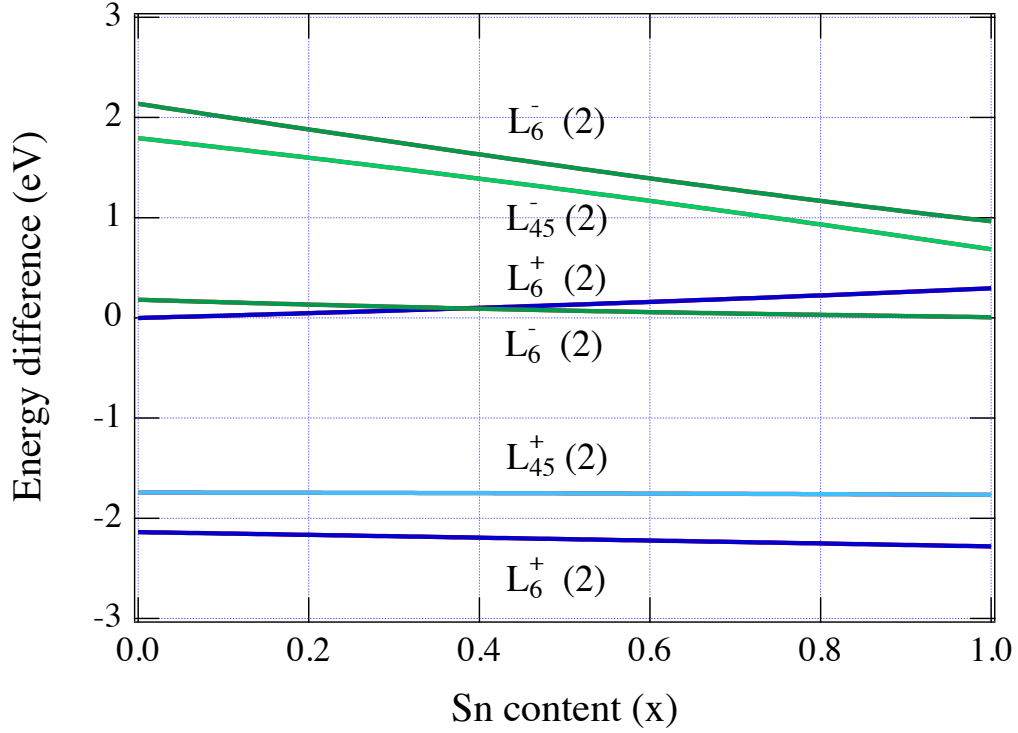


図 1.2.2 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の Sn のドーピング量に対する L 点のエネルギー変化. $L_{6/45}^{+/-}$ は二重群の既約表現の名前を表す. 上付きの添字はパリティである. また括弧は縮退数を表す. $x = 0.38$ で価電子帯の頂点のバンド L_6^+ と伝導帯の底のバンド L_6^- の順序が入れ替わる. 文献 [72] のバンド計算を元に作成した.

が 1 に近いほどディラック電子性が高い. Bi の L 点では $M = 1.00 \sim 1.02$ である [47]. 図 1.2.3 は $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ における M の Sn ドーピング量 x の依存性である. PbTe におけるゼロ磁場極限での M は理論計算では $M = 0.83$ である [52]. またバンドギャップが完全に閉じているとき $M = 1$ となり, Wolff ハミルトニアンで有効的に記述される三次元ディラック電子が現れる.

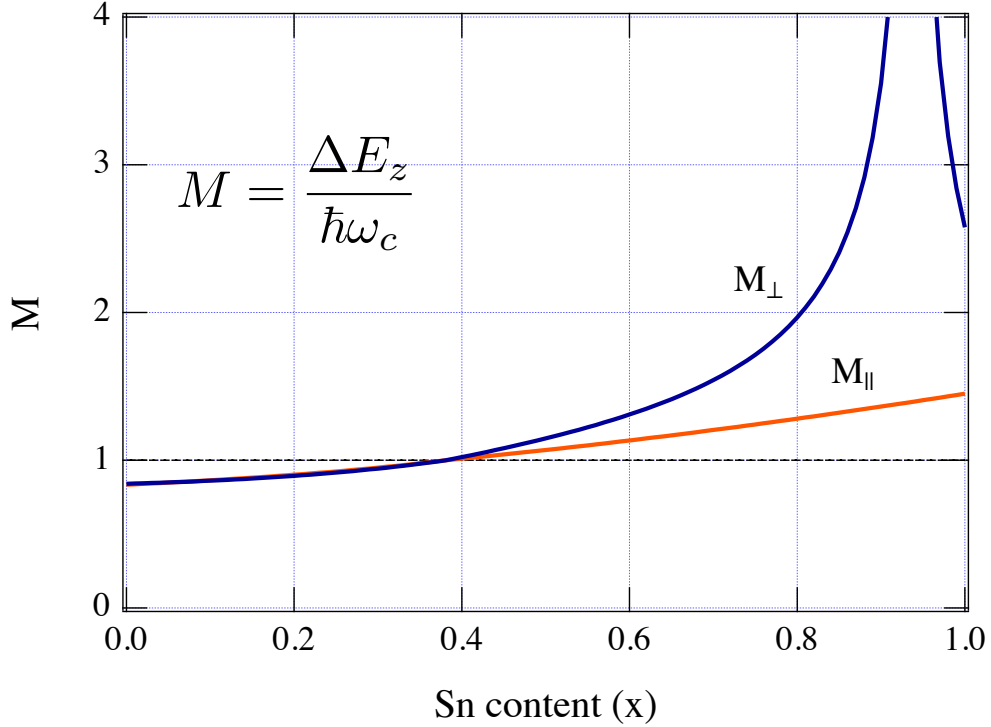


図 1.2.3 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の Sn のドーピング量に対する M の変化. M_{\parallel} , M_{\perp} はそれぞれ, $[111]$ 方向に対して, 平行と垂直な磁場をかけた場合を意味する. $x = 0$ では $M=0.83$ になる. $x = 0.38$ では L 点のギャップが閉じ, $M = 1$ となる.

1.3 $k \cdot p$ 理論と等方的 Wolff ハミルトニアン

1.3.1 $k \cdot p$ 理論

結晶中の周期的ポテンシャル下でのシュレーディンガー方程式の解は, ブロッホの定理によりブロッホ波動関数で与えられる.

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.3.1)$$

n はブロッホバンドの添字を指定する. $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は完全系を成すので任意の波動関数を展開することができる. また次にバンド端を $\mathbf{k} = 0$ としたときに, $\mathbf{k} = 0$ から測った \mathbf{k} で指定される以下の関数を考える [79].

$$\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}=0}(\mathbf{r}) \quad (1.3.2)$$

式 (1.3.1) が完全系を成すならば, 式 (1.3.2) も完全系を成すことを示すことができる (証明は文献 [79] を参照). 結晶中の周期ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ と SOC が存在する場合の一粒子ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \quad (1.3.3)$$

である. 演算子の $\hat{\cdot}$ は特に混乱を招かないと思われるので省略する. またスピンをもつ場合への拡張も容易なのでスピンの添字については無視する. 位置表示の波動関数に対するシュレーディンガー方程式は以下のように与えられる.

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.4)$$

波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を式 (1.3.2) を用いて展開すると,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} c_n(\mathbf{k}) \chi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.3.5)$$

これを用いるとシュレーディンガー方程式は

$$\sum_n \int d\mathbf{r} d\mathbf{k} \chi_{n',\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H} \chi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) c_n(\mathbf{k}) = E c_{n'}(\mathbf{k}') \quad (1.3.6)$$

となる. 上式に $\chi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}=0}(\mathbf{r}) \equiv e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,0}(\mathbf{r})$ を代入すると,

$$\sum_n \int d\mathbf{r} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n',0}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,0}(\mathbf{r}) c_n(\mathbf{k}) = E c_{n'}(\mathbf{k}') \quad (1.3.7)$$

ハミルトニアン (1.3.3) を用いて上式の左辺を整理すると

$$\mathcal{H} u_{n,0}(\mathbf{r}) = \epsilon_{n,0} u_{n,0}(\mathbf{r}) \quad (1.3.8)$$

$$\epsilon_{n,0} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \quad (1.3.9)$$

$$\boldsymbol{\pi} \equiv \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4mc^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \quad (1.3.10)$$

とおくことにより,

$$\begin{aligned} & \sum_n \int d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{nn'} \left(\epsilon_{n,0} + \frac{k^2}{2m} \right) c_n(\mathbf{k}) \\ & + \sum_n \int d\mathbf{r} d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{n',0}^*(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}}{m} u_{n,0}(\mathbf{r}) c_n(\mathbf{k}) = E c_{n'}(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

となる．式 (1.3.11) の第二項目の空間依存性は格子の周期性をもつことから

$$u_{n',0}^*(\mathbf{r}) \frac{\pi}{m} u_{n,0}(\mathbf{r}) = \sum_m B_{nn'}^m e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} \quad (1.3.12)$$

とフーリエ級数展開できる．フーリエ係数は、

$$B_{nn'}^m = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} u_{n',0}^*(\mathbf{r}) \frac{\pi}{m} u_{n,0}(\mathbf{r}) \quad (1.3.13)$$

である．ただし Ω は単位包の体積である．これを代入すると式 (1.3.11) の第二項目は

$$(2\pi)^3 \sum_{m,n} \int d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{K}_m) \mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_{n,n'}^m c_n(\mathbf{k}) \quad (1.3.14)$$

となる． m の和において、 $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K}_m$ が第一ブリルアンゾーンにいるときは $\mathbf{K}_{m=0}$ である．よって式 (1.3.11) の第二項目は

$$(2\pi)^3 \sum_n \int d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_{n,n'}^0 c_n(\mathbf{k}) \quad (1.3.15)$$

となる．ここで $\mathbf{B}_{nn'}^0$ は

$$\mathbf{B}_{nn'}^0 = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} u_{n',0}^*(\mathbf{r}) \frac{\pi}{m} u_{n,0}(\mathbf{r}) \quad (1.3.16)$$

である． $\mathbf{P}_{n,n'}/m \equiv \mathbf{B}_{nn'}^0$ とおき、まとめると式 (1.3.11) は以下ようになる．

$$\sum_{n'} \left[\left(\epsilon_{n',0} + \frac{k^2}{2m} \right) \delta_{nn'} + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{nn'}}{m} \right] c_{n'}(\mathbf{k}) = E c_n(\mathbf{k}) \quad (1.3.17)$$

スピンの添え字を明記すると、

$$\sum_{n',\sigma'} \left[\left(\epsilon_{n'\sigma',0} + \frac{k^2}{2m} \right) \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{nn'}^{\sigma\sigma'}}{m} \right] c_{n'\sigma'}(\mathbf{k}) = E c_{n\sigma}(\mathbf{k}) \quad (1.3.18)$$

となる．これが $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ の基本方程式であり $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン構築の出発点となる．このようにブロッホ波動関数を用いたシュレーディンガー方程式には $\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}$ という新たな項が加わる． $\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}$ 項の扱い方の方法論は多岐に渡るが、基本的な方針は時間空間反転対称性と結晶のもつ点群対称性を用いることである [26, 78, 88, 107]．これらの対称性を課すことで興味のあるエネルギー領域における有効模型の構築、もしくはバンド分散を抽出できる．

1.3.2 Wolff ハミルトニアンの導出

Cohen-Blount による 2 バンド模型は Bi の L 点における電子状態をよく再現する [21]. 後にこれは Wolff によりディラック方程式と本質的に等価であることが示された [108]. 本節ではこの導出について述べる. まず $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ の基本方程式 (1.3.18) において, 考えるバンドをスピン縮退を含む 2 バンドに限定する. したがって, $n = \{1, 2\}$, $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ である. バンド端におけるエネルギーを $\epsilon_{1\uparrow,0} = \epsilon_{1\downarrow,0} = \Delta$, $\epsilon_{2\uparrow,0} = \epsilon_{2\downarrow,0} = -\Delta$ とおく. 速度行列要素は

$$\frac{\mathbf{P}_{nn'}^{\sigma\sigma'}}{m} = \langle n\sigma | \mathbf{v} | n'\sigma' \rangle = \mathbf{v}_{nn'}^{\sigma\sigma'} \quad (1.3.19)$$

とする. こうしてハミルトニアンは以下のように表される.

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \begin{bmatrix} \Delta + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{11}^{\uparrow\uparrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{11}^{\uparrow\downarrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\uparrow\uparrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\uparrow\downarrow} \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{11}^{\downarrow\uparrow} & \Delta + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{11}^{\downarrow\downarrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\downarrow\uparrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\downarrow\downarrow} \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\uparrow\uparrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\uparrow\downarrow} & -\Delta + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{22}^{\uparrow\uparrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{22}^{\uparrow\downarrow} \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\downarrow\uparrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\downarrow\downarrow} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{22}^{\downarrow\uparrow} & -\Delta + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{22}^{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix} \quad (1.3.20)$$

系が時間空間反転対称性をもつと仮定する. 空間反転を I , 時間反転を Θ とすると, 時空間反転 $C = I\Theta$ に対し以下の関係がある.

$$\mathbf{v}_{mn}^{\uparrow\uparrow} = \langle m \uparrow | \mathbf{v} | n \uparrow \rangle = \langle C \mathbf{v} n \uparrow | C m \uparrow \rangle = \langle n \downarrow | \mathbf{v} | m \downarrow \rangle = \mathbf{v}_{nm}^{\downarrow\downarrow} \quad (1.3.21)$$

$$\mathbf{v}_{mn}^{\uparrow\downarrow} = \langle m \uparrow | \mathbf{v} | n \downarrow \rangle = \langle m \uparrow | \mathbf{v} C n \uparrow \rangle = \langle C \mathbf{v} C n \uparrow | C m \uparrow \rangle = -\mathbf{v}_{nm}^{\downarrow\uparrow} \quad (1.3.22)$$

ここで $C\psi_{n\uparrow} = \psi_{n\downarrow}$, $\langle \phi | \psi \rangle = \langle C\psi | C\phi \rangle$, および $C^2 = -1$ という関係を使った. またバンド端で速度がゼロであることを課す. このとき $\mathbf{v}_{nn}^{\uparrow\uparrow} = \mathbf{v}_{nn}^{\downarrow\downarrow} = 0$. $\mathbf{v}_{12}^{\uparrow\uparrow} = \mathbf{t}$, $\mathbf{v}_{12}^{\uparrow\downarrow} = \mathbf{u}$ とおくと,

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Delta & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \\ 0 & \Delta & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} & -\Delta & 0 \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & 0 & -\Delta \end{bmatrix} \quad (1.3.23)$$

となる. これが Cohen と Blount により導かれた 2 バンド模型である [21]. 適切な基底を用いることで, $\text{Re}(\mathbf{t})$ は 0 にすることができる [108]. よって最終的に,

$$\mathcal{H} = \Delta\beta + i\hbar \mathbf{k} \cdot \left[\sum_{\mu=1}^3 \mathbf{W}(\mu) \beta \alpha_{\mu} \right] \quad (1.3.24)$$

を得る．ここで α, β は

$$\alpha_\mu = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad (1.3.25)$$

であり， \mathbf{W} は

$$\begin{aligned} \mathbf{W}(1) &= \text{Im}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{W}(2) &= \text{Re}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{W}(3) &= \text{Im}(\mathbf{t}) \end{aligned} \quad (1.3.26)$$

である．さらに等方性を仮定し，

$$\begin{aligned} \mathbf{W}(1) &= (\gamma, 0, 0) \\ \mathbf{W}(2) &= (0, \gamma, 0) \\ \mathbf{W}(3) &= (0, 0, \gamma) \end{aligned} \quad (1.3.27)$$

とおく．等方的 Wolff ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Delta & i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{bmatrix} \quad (1.3.28)$$

となる．本研究では一貫して二次元系を考えるため，式 (1.3.28) において $k_z = 0$ とする．Wolff ハミルトニアンに対するエネルギー固有状態は正エネルギー解に対して，エネルギー固有関数は正エネルギー解に対して，

$$|1, \mathbf{k}\rangle = N_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} = N_{\mathbf{k}} |c \uparrow\rangle - N_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{i\phi_{\mathbf{k}}} |v \downarrow\rangle, \quad (1.3.29)$$

$$|2, \mathbf{k}\rangle = N_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -\frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ 0 \end{pmatrix} = N_{\mathbf{k}} |c \downarrow\rangle - N_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} |v \uparrow\rangle \quad (1.3.30)$$

である．負エネルギー解に対しては，

$$|3, \mathbf{k}\rangle = N_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -N_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{i\phi_{\mathbf{k}}} |c \downarrow\rangle + N_{\mathbf{k}} |v \uparrow\rangle, \quad (1.3.31)$$

$$|4, \mathbf{k}\rangle = N_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} -\frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -N_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar\gamma|\mathbf{k}|}{\Delta + E_{\mathbf{k}}} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} |c \uparrow\rangle + N_{\mathbf{k}} |v \downarrow\rangle \quad (1.3.32)$$

となる． $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \gamma^2 \mathbf{k}^2}$ である． $N_{\mathbf{k}}$ は規格化定数で以下のようになる．

$$N_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\Delta + E_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}}. \quad (1.3.33)$$

Dirac-Pauli(DP) 表示の γ 行列によって表される Dirac 方程式に対して，Wolff ハミルトニアンを表すための γ 行列の表示を Wolff 表示と呼ぶことにする．ここでのちの便宜の為に DP 表示と Wolff(W) 表示を繋ぐユニタリ変換を与えておく．これは

$$\mathcal{S} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & iI \end{bmatrix} \quad (1.3.34)$$

である．実際，DP 表示のディラックハミルトニアン [24, 90] は

$$\mathcal{H}_{\text{DP}} = \begin{bmatrix} mc^2 & c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -mc^2 \end{bmatrix} \quad (1.3.35)$$

であるが，ユニタリー変換により，

$$\mathcal{S}^{-1} \mathcal{H}_{\text{DP}} \mathcal{S} = \begin{bmatrix} mc^2 & ic\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -ic\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -mc^2 \end{bmatrix} \quad (1.3.36)$$

となる． $c \rightarrow \gamma$ ， $mc^2 \rightarrow \Delta$ ， $\mathbf{p} \rightarrow \hbar\mathbf{k}$ と読み変えれば確かにディラックハミルトニアンと Wolff ハミルトニアンがユニタリー変換で結ばれることが分かる．ディラック方程式は γ 行列の表示によらない [90]．したがって等方的 Wolff ハミルトニアンはディラックハミルトニアンと等価であることが分かる．ただしエネルギースケールは真空中のディラック方程式と Wolff ハミルトニアンでは大きく異なる．またバンドの傾きを与えるパラメータである γ も真空中では光速 c と対応するが，意味合いが大きく異なる． γ は元を辿れば $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ の行列要素から生じたものであり，SOC の効果を含んでいる．スピンと電子の軌道運動が不可分であるという点は類似している．なぜならば，ディラック方程式と Wolff もどちらも σ_z の固有状態であった \uparrow, \downarrow が前者では $\mathbf{p} \neq 0$ の点，後者ではバンド端を除いた点で σ_z の固有状態でなくなる．ただし σ_z の基底は前者は実スピン，後者は SOC 存在下でのスピンである．したがって Wolff ハミルトニアンで記述されるような系において軌道運動を行う電子状態は異なるバンドとスピンの線形結合で表される．このような状態をしばしば SOC がスピンと軌道を“混ぜる”と言うこともある．

W 表示での時間反転演算子を定義していく．また時間反転演算子の二乗の値を調べることは，量子補正効果の振る舞いのある程度予測可能にする．DP 表示における時間反転演算子は \mathcal{K} を複素共役演算子として，

$$\Theta_{\text{DP}} = \gamma^1 \gamma^3 \mathcal{K} = \begin{bmatrix} i\sigma_y & 0 \\ 0 & i\sigma_y \end{bmatrix} \mathcal{K} \quad (1.3.37)$$

となる．したがって W 表示では時間反転演算子は

$$\begin{aligned} \Theta_{\text{W}} &= \mathcal{S}^{-1} \gamma^1 \gamma^3 \mathcal{K} \mathcal{S} \\ &= \begin{bmatrix} i\sigma_y & 0 \\ 0 & -i\sigma_y \end{bmatrix} \mathcal{K} \end{aligned} \quad (1.3.38)$$

となる．Dirac ハミルトニアン，Wolff ハミルトニアンどちらも時間反転演算子の二乗が負になる： $\Theta_{\text{W/DP}}^2 = -1$ ．これは AII クラスもしくはシンプレクティッククラスと呼ばれる [7, 30]．

第 4 章ではエネルギー固有状態としてヘリシティ演算子との同時固有状態を用いる．以下にヘリシティ演算子との同時固有状態について述べる．運動する相対論的粒子に対してスピン σ_z はもはや保存量ではなくなる．相対論的粒子に対する保存量はヘリシティである [90]．ヘリシティ演算子は以下で与えられる．

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix} \quad (1.3.39)$$

ここで

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix} \quad (1.3.40)$$

とおいた．同時固有状態は正エネルギー解に対して，

$$\psi_{1\mathbf{k}} = |1, \mathbf{k}\rangle = \frac{N_{\mathbf{k}}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \\ -iY \\ -iY e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (1.3.41)$$

$$\psi_{2\mathbf{k}} = |2, \mathbf{k}\rangle = \frac{N_{\mathbf{k}}}{2} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ 1 \\ -iY e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ iY \end{pmatrix} \quad (1.3.42)$$

である．負エネルギー解に対しては，

$$\psi_{3\mathbf{k}} = |3, \mathbf{k}\rangle = \frac{N_{\mathbf{k}}}{2} \begin{pmatrix} -iY \\ -iY e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \\ 1 \\ e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (1.3.43)$$

$$\psi_{4\mathbf{k}} = |4, \mathbf{k}\rangle = \frac{N_{\mathbf{k}}}{2} \begin{pmatrix} -iY e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ iY \\ -e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.3.44)$$

である。ただし、

$$Y = \frac{\gamma|\mathbf{k}|}{E_{\mathbf{k}} + \Delta} \quad (1.3.45)$$

とおいた。また $k_x = |\mathbf{k}|\cos\phi_{\mathbf{k}}$, $k_y = |\mathbf{k}|\sin\phi_{\mathbf{k}}$ とした。

1.4 スピン緩和機構

スピントロニクスを実現する際の障害の一つにスピン輸送の過程においてそのコヒーレンスが失われるスピン緩和がある。主に 4 つのスピン緩和機構が金属や半導体で有意であるとされ、それらは、Elliott-Yafet 機構 [33, 110], Dyakonov-Perel 機構 [28], Bir-Aronov-Pikus 機構 (BAP) [15], 超微細相互作用機構 [29] と呼ばれる。Elliott-Yafet 機構において電子波動関数は格子のスピン軌道結合により上向きスピンと下向きスピンの混ざっているためにスピン緩和を起こす。Dyakonov-Perel 機構は空間反転対称性がない固体におけるスピン緩和機構である。このスピン緩和は電子が散乱によってランダムな有効磁場を感じるために起こる。BAP 機構は p ドープの半導体において重要な機構である。電子正孔間の交換相互作用によって局所的な磁場のゆらぎによって電子スピンの反転される。ヘテロ構造をもつ半導体において電子スピンと核スピンの超微細構造よりスピン緩和が起きる。これは局在スピンやスピンにおいて支配的となる。本論文ではとくに関わりが深い EY 機構について以下に記す。

1.4.1 Elliott-Yafet 機構

格子のスピン軌道結合効果によって電子波動関数が影響を受けるのであれば、伝導電子のスピンは通常の運動量散乱 (フォノンや不純物による) を通して緩和する。スピン軌道結合存在下において、一電子ブロッホ波動関数はもはや σ_z の固有状態ではなく \uparrow と \downarrow が混ざった状態となっている。もし固体が空間反転対称性をもつならばブロッホ状態における \uparrow と \downarrow は以下のように書ける [33, 110]。

$$\Psi_{\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) = a_n(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b_n(\mathbf{r})|\downarrow\rangle \quad (1.4.1)$$

$$\Psi_{\mathbf{k},\downarrow}(\mathbf{r}) = a_{-\mathbf{k},n}^*(\mathbf{r})|\downarrow\rangle - b_{-\mathbf{k},n}^*(\mathbf{r})|\uparrow\rangle \quad (1.4.2)$$

この二つのブロッホ状態は縮退しており，空間反転と時間反転で結ばれる．ほとんどすべての場合 a はほとんど 1 に近く， b は 1 より十分小さい．運動量散乱は典型的に低温では不純物によって起こり，高温ではフォノンによって起きる．運動量緩和時間 τ_0 とスピン緩和時間 τ_s は以下のような関係を満たす．

$$\tau_0 \sim \frac{\tau_s}{\alpha} \quad (1.4.3)$$

ここで α は運動量緩和の際のスピン緩和確率と解釈できる．ボルン近似の範囲で $\alpha \sim \langle |b|^2 \rangle$ となる．ただし $\langle \cdots \rangle$ はフェルミ面での角度平均を表す．この関係式 (1.4.3) は Elliott 関係式と呼ばれる [63, 84]．

第2章 量子輸送理論

線形応答理論とは外場の一次に比例する範囲で系の応答を見る理論である．久保公式を用いることで電気伝導度，熱伝導度，磁化率等の多くの物理量が微視的な理論から計算できる [66, 80, 89]．久保公式における直流電気伝導度は以下で与えられる（導出は付録 A を参照）．

$$\sigma = \frac{\hbar e^2}{\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\hbar^2}{m^2} k_x k'_x \langle G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) G^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}}$$

$G^{R/A}$ は先進/遅延グリーン関数である．グリーン関数を用いることで，ダイアグラムを用いた摂動論の議論が可能となる [2, 38, 80, 89]． $\langle \dots \rangle_{\text{imp}}$ は不純物平均を意味する．本研究で扱う弱局在効果は不純物散乱による高次の補正の効果である．本章では不純物効果について説明し，弱局在効果の計算方法を記す．また SOC が存在する場合の弱局在効果の理論である，HLN 理論について説明する．

2.1 不純物散乱の効果と不純物平均

結晶中の不純物や格子欠陥による電子の散乱は電気抵抗を生じる．不純物散乱の効果はグリーン関数の自己エネルギー部分として取り込める．不純物散乱の過程として図 2.1.1 のような過程が考えられる．図 2.1.1(a)~(e) のようなグリーン関数部分の切断によって分割できないようなダイアグラムを既約ダイアグラムと呼ぶ．(a) のような一次の過程はエネルギーの基準を変えるだけなので 0 とすることができる．また (c)，(d)，(f) のような高次の過程は不純物散乱のエネルギーに比べて電子のもつエネルギーが大きいときは無視することができる [89]．この条件を $E_F \tau \gg 1$ ，または良い金属であると言う．ただし τ は不純物散乱による緩和時間である．(e) のダイアグラムについては後述する．本研究で扱う弱局在領域においては金属的な伝導領域を考えるため， $E_F \tau \gg 1$ が満たされている場合に相当する．したがって (b) の過程のみを考えればよい．(b) のダイアグラムにより得られるフェルミ面上の電子の運動量緩和時間は最低次のボルン近似と対応し以下で与えられる [51]．

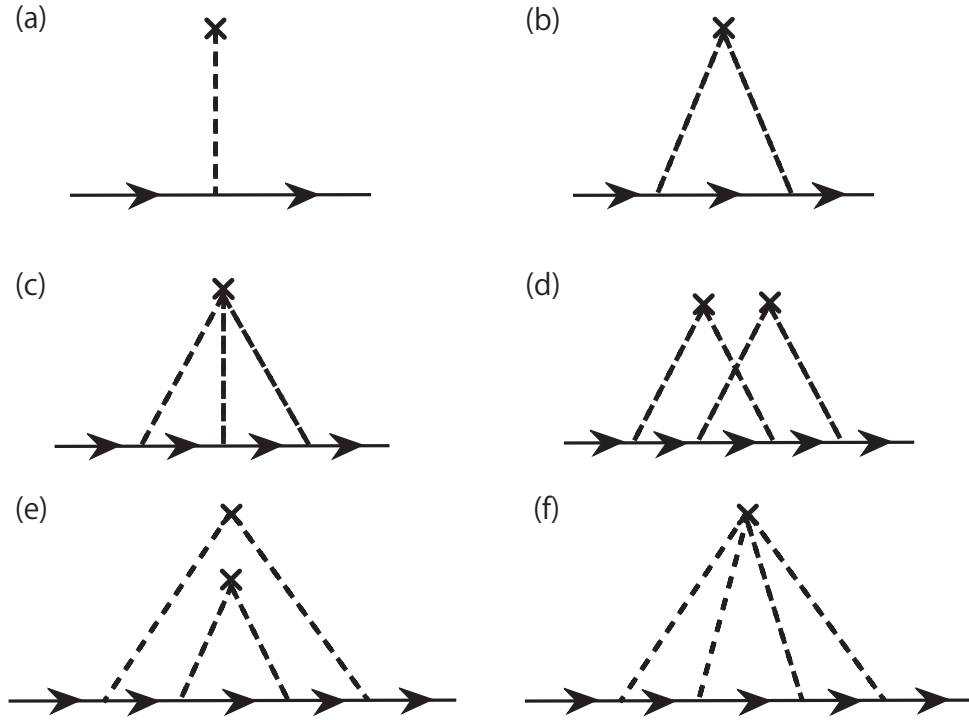


図 2.1.1 不純物散乱の効果を表す既約ダイアグラム．矢印は無摂動グリーン関数を表し，点線とバツ印は不純物相互作用を表す．(a)1 次の不純物散乱を表す．(b)～(e) は (a) の寄与を無視したときの既約ダイアグラムでそれぞれ (b)2 次，(c)3 次，(d)～(e)4 次の不純物散乱を表す．

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{imp}} \delta(E_F - E_{\mathbf{k}'}) \quad (2.1.1)$$

である．不純物平均は不純物位置に関する平均操作である． \mathbf{R}_i は i 番目の不純物の位置を指定する．まずは行列要素について求める．不純物ポテンシャルのフーリエ展開は以下で与えられる．

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)) \quad (2.1.2)$$

ボルン散乱の行列要素は一粒子状態 $|\mathbf{k}\rangle$ と $|\mathbf{r}\rangle$ を用いることで、ポテンシャルのフーリエ変換の形で与えられる.

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \\
 &= \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} \sum_{i, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \\
 &= \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} \sum_i \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} u(\mathbf{q}) (2\pi)^d \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{k}') e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} \\
 &= \frac{1}{\Omega} u_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i}
 \end{aligned} \tag{2.1.3}$$

ただし系の次元を d , 体積を Ω と表した. したがって不純物の行列要素の二乗に対し不純物平均を取ったものは,

$$\langle |\langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{imp}} = |u_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \left\langle \sum_{i,j} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \right\rangle_{\text{imp}} \tag{2.1.4}$$

と表される. 式. (2.1.4) における指数関数は $i \neq j$ のとき複素平面の単位円上にランダムに分布するため, 和を取ると互いに打ち消す. したがって $i = j$ のときのみ有限に残る. よって

$$\langle |\langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{imp}} = \frac{n}{\Omega} |u_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \tag{2.1.5}$$

となる. n は不純物濃度である. よって運動量緩和時間は

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = 2\pi \frac{n}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(E_F - E_{\mathbf{k}'}) \tag{2.1.6}$$

となる. $V(\mathbf{r})$ は短距離型であるとして, $u_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ の波数依存性を無視し, u_0 とおくと,

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi n u_0^2 \rho_0 \tag{2.1.7}$$

となる. ρ_0 はフェルミ面上における単位体積あたりの状態密度である. 次に一粒子グリーン関数に対する不純物平均について考える. まず一粒子運動量表示の不純物効果を含んだグリーン関数は

$$G^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 - V \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle \tag{2.1.8}$$

である. 上付きの符号が G^{R} , 下付きの符号が G^{A} に対応する. 無摂動一粒子グリーン関数の波数表示は

$$G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) \equiv \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle = G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, E) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tag{2.1.9}$$

である。ただし $G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, E)$ は

$$G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{E - E_{\mathbf{k}} \pm i\delta} \quad (2.1.10)$$

である。不純物効果を含んだグリーン関数に対する演算子展開は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 - V \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle &= \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle \\ &+ \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}_1 \right\rangle \langle \mathbf{k}_1 | V | \mathbf{k}_2 \rangle \left\langle \mathbf{k}_2 \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle \\ &+ \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}_1 \right\rangle \langle \mathbf{k}_1 | V | \mathbf{k}_2 \rangle \left\langle \mathbf{k}_2 \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}_3 \right\rangle \\ &\times \langle \mathbf{k}_3 | V | \mathbf{k}_4 \rangle \left\langle \mathbf{k}_4 \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

不純物平均を取り、図 2.1.2 の過程を考えると、

$$\begin{aligned} \langle G^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}} &= G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}) \frac{nu_0^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1} G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}_1) G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}') \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ &+ G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}) \left[\frac{nu_0^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1} G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}_1) G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}') \right]^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ &+ \dots \\ &= G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[1 - \frac{nu_0^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}') G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

となる。したがって不純物平均を取ったグリーン関数は、

$$\langle G^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}} = \frac{\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}}{E_F - E_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\text{R/A}}} \quad (2.1.13)$$

$$\Sigma^{\text{R/A}} = \frac{nu_0^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} G_0^{\text{R/A}}(\mathbf{k}') \quad (2.1.14)$$

Σ は自己エネルギーである。式 (2.1.14) は

$$\frac{1}{x \pm i\delta} = \frac{P}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (2.1.15)$$

を用いると、

$$\Sigma^{\text{R/A}} = \mp i\pi \frac{nu_0^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} \delta(E_F - E_{\mathbf{k}'}) = \mp \frac{i}{2\tau} \quad (2.1.16)$$

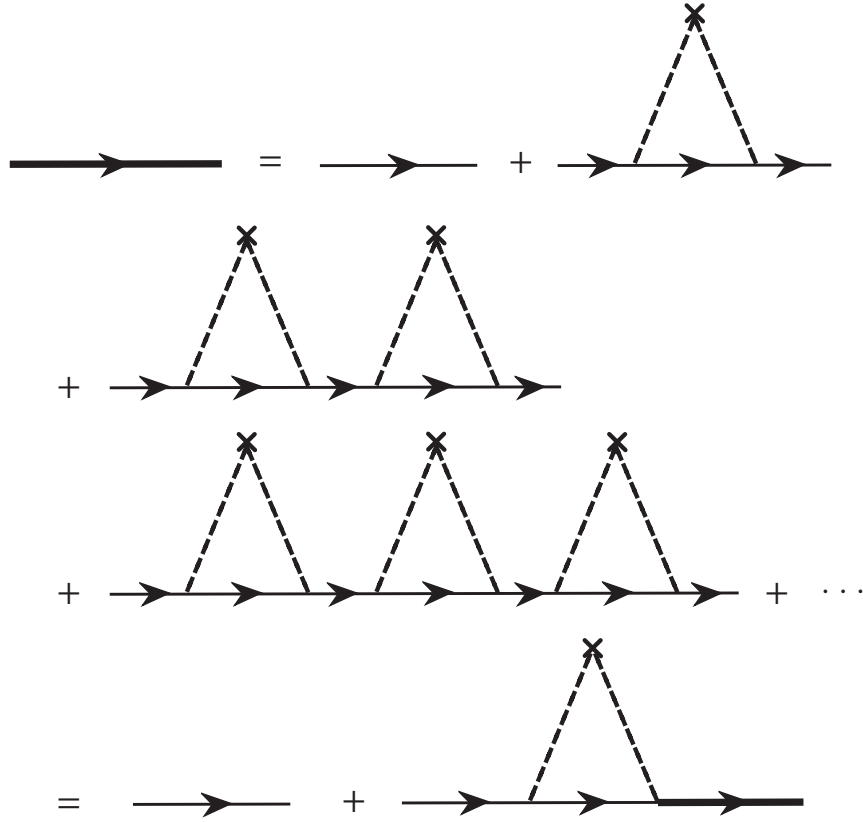


図 2.1.2 最低次のボルン近似による不純物散乱を含んだグリーン関数．太線は不純物平均を取った後の不純物相互作用を含んだグリーン関数 (2.1.13) を表す．

となる．ただしここで Σ の実部はフェルミエネルギーの再定義により吸収できるため無視した．また式 (2.1.7) を用いた．図 2.1.1(e) のような過程は自己無同着ボルン近似により取り込まれる．不純物散乱が弱い場合，自己無同着ボルン近似は最低次のボルン近似と同様の結果を与える．また (c), (f) のような一つの不純物位置から何回も散乱を受ける過程を無限次まで取り込む方法を t 行列近似と呼ぶ．本研究の弱局在効果の計算では一貫して図 2.1.1(b) の最低次のボルン近似のみを扱う．この正当性については節 2.3 で述べる．

2.1.1 スピン軌道結合散乱の効果

不純物がスピン軌道結合 (SOC) 効果をもっている場合，SOC 項は以下で与えられる．

$$H_{so} = \lambda_{so} \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \quad (2.1.17)$$

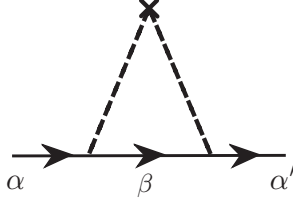


図 2.1.3 SOC を持った不純物散乱の効果を表すダイアグラム. α , α' , β はスピンの状態を表す.

ここで σ はパウリ行列である. また λ_{so} は SOC の強さである. SOC がある場合, 1 電子状態の spin 依存性を考慮する必要がある. このときの散乱の過程をダイアグラムで表すと図 2.1.3 のようになる. このときボルン散乱の行列要素は

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}', \beta | H_{\text{so}} | \mathbf{k}, \alpha \rangle &= -i\lambda_{\text{so}} \sigma_{\beta\alpha} \cdot \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} [\nabla V(\mathbf{r}) \times \nabla] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
 &= i\lambda_{\text{so}} u_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \sigma_{\beta\alpha} \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \sum_i e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} \\
 &= i\lambda_{\text{so}} u_0 \sigma_{\beta\alpha} \cdot (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}) \sum_i e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.1.18)
 \end{aligned}$$

で与えられる. ただし前節同様, 短距離型のポテンシャルを仮定し $u_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}$ の波数依存性を無視した. これを用いて SOC による緩和時間を計算すると

$$\frac{1}{\tau_{\text{so}}} = 2\pi n u_0^2 \rho_0 \lambda_{\text{so}}^2 \langle [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}]^2 \rangle_F \quad (2.1.19)$$

となる. ただし $\langle \dots \rangle_F$ はフェルミ面上での角度平均で,

$$\langle \dots \rangle_F = \frac{1}{2\pi} \int d\theta \quad (2.1.20)$$

である. SOC による緩和時間は対角的であるため, グリーン関数の分母において運動量緩和時間を τ_0 とすると全体の緩和時間は

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{\text{so}}} \quad (2.1.21)$$

と変更すればよい.

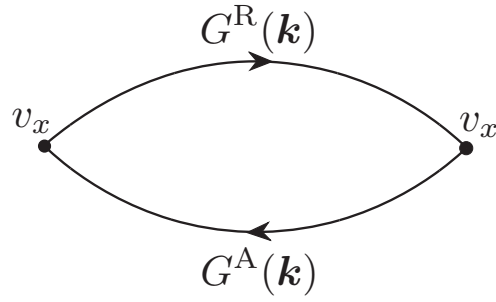


図 2.2.1 電気伝導度に対応するダイアグラム.

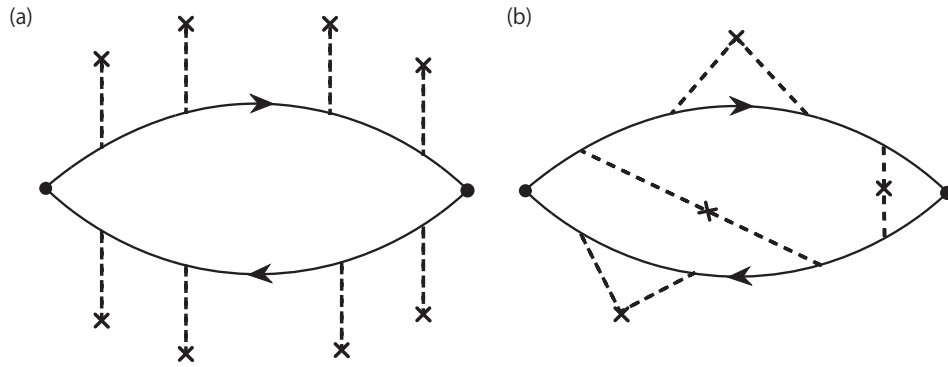


図 2.2.2 電流-電流相関関数に対する不純物平均: (a) 不純物平均を取る前. (b) 不純物平均を取った後.

2.2 電気伝導度の導出

電気伝導度の計算において、次の相関関数の不純物平均を取る必要がある [80, 89].

$$\langle G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) G^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}} \quad (2.2.1)$$

図 2.2.2(a) のダイアグラムは不純物平均を実行後すると、図 2.2.2(b) のようなダイアグラムとなる．ここでは一番簡単な近似として不純物線が二つのグリーン関数を跨がないような状況を考える．このときは二つのグリーン関数に対する不純物平均をグリーン関数それぞれ

独立に取れる．このとき直流電気伝導度 σ は

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{\hbar e^2}{\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\hbar^2}{m^2} k_x k'_x \langle G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}} \langle G^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}} \\ &= \frac{\hbar e^2}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2}{m^2} k_x^2 G^R(\mathbf{k}, E_F) G^A(\mathbf{k}, E_F)\end{aligned}\tag{2.2.2}$$

積分を実行すると絶対零度においては

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{e^2 E_F \tau}{\pi \hbar^2}\tag{2.2.3}$$

となりドルーデの古典的な理論と一致する．これまでの計算により量子論に基づく久保公式に対して適切な近似を施すことにより古典の結果を再現するということが分かった．逆に言えば，近似により落とした効果に量子論的な効果が含まれていた可能性がある．本研究で扱う弱局在効果はまさにその量子論の効果である．これを次節で扱う．

2.3 アンダーソン局在と量子補正効果

結晶が周期的なポテンシャルをもつ場合，ブロッホの定理により，波動関数は周期関数と平面波の積によって記述される．これは結晶中では電子の波動関数が周期的に，かつ一様に広がっているという描像を与えていることを意味する．一方で現実の物質は，不純物や格子欠陥のような乱れによってポテンシャルの周期性が破れている．アンダーソンは乱れのある系においては電子の波動関数は局在し，その存在確率は十分時間が経過した後も小さくならないという主張をした [9]．これは今日ではアンダーソン局在として知られている．この電子の局在の直感的な描像は次のように考えることができる．まず図 2.3.1 のように，結晶中の不純物や格子欠陥によって電子波が多重散乱され，例えば $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ という経路を通るとする．系が時間反転対称性を持つ場合，逆向きの過程 $5 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ も許されるために電子波同士が干渉し定在波を生じる．その結果として電気伝導率の減少を生む．

以上の不規則系における電気伝導率の減少を別の角度から議論したのが，アブラハムズら 4 人組によるスケーリング理論である [1]．スケーリング理論ではコンダクタンスの系のサイズ依存性を，統計力学におけるスケーリング仮説に基づいて議論した．結果として一，二次元系では必ず局在が起こり，三次元系では不純物濃度によって，金属絶縁体転移が起きるという結論が得られる．またこの理論の重要な結論に，金属領域から絶縁体領域へと転移する前に局在の前駆現象が見られるという点がある．この領域を弱局在領域と呼ぶ．この弱局在

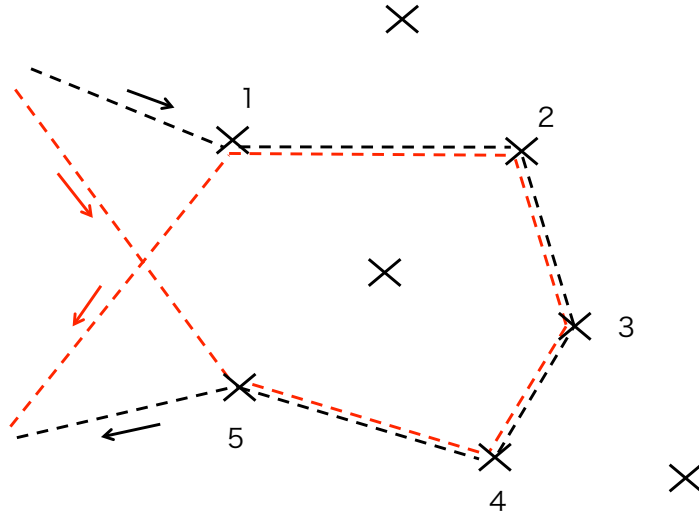


図 2.3.1 電子波の多重散乱を表す概略図．バツ印が不純物を表す．黒と赤の点線は電子波を表しており，それぞれ時間反転の関係にある．

効果，あるいは量子補正効果を含んだコンダクタンス g はスケーリング理論によると，

$$g(L) = g_0 - g_a \log \left(\frac{L}{L_0} \right)$$

と表される．第一項の g_0 は二次元系の場合，ドルーデの式 (2.2.3) と等しい．この領域において，二次元系では系のスケール L の対数に依存して電気伝導度が減少する．第二項は $g \rightarrow \infty$ の極限を考えたときの，漸近展開の一次として得られる [1]．ドルーデの式 (2.2.3) より，第一項が第二項に比べて十分大きいという条件は $E_F \tau \gg 1$ という条件と等しい．このようにして弱局在効果を金属状態を出発点とし，不純物効果を $E_F \tau$ を展開パラメータとする，摂動展開として扱うことが可能になる．弱局在領域の電気伝導度の計算は，Gorikov らによって示された [48]．系のスピン回転対称性が破れているような場合は，二次元系においても金属的なふるまい，すなわちコンダクタンスが系のスケールの増加に伴い増加するという現象が見られる [54]．この反局在効果はスピン軌道散乱の他にも，ベリー位相によっても引き起こされることが，グラフェンやトポロジカル絶縁体において示されている [10, 14, 81, 100]．本節では前節で紹介した電気伝導度の理論に対する弱局在による補正の効果について議論する．二次元系における弱局在領域の電気伝導度のふるまいが対数依存性をもつことを示す．またスピン軌道散乱を考えることにより，弱局在効果による補正項の符号が逆転する弱反局在効果について示す．

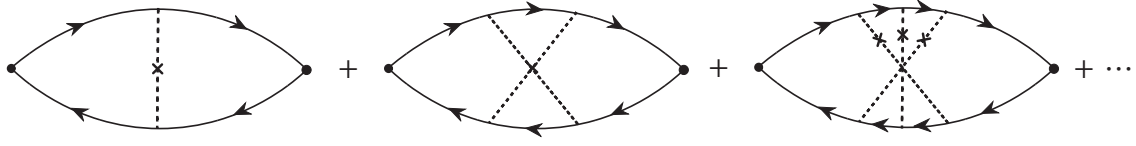


図 2.4.1 電気伝導度に対する局在の補正を表すダイアグラム

2.4 量子補正効果の計算

前節の電気伝導度の計算において二つの電子線を跨ぐような不純物の寄与は無視していた。本章では特に不純物線が交差するような過程を考える (図 2.4.1)。このダイアグラムは二粒子の運動量の和 $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ が小さい領域で特異性をもつことが知られている [68]。この特異性が電気伝導度に対する量子補正効果を与える [48]。下側のグリーン関数の向きを反転させれば粒子-粒子間のはしご型の散乱過程になる。このダイアグラムは等比級数で表されるため収束半径を超えない限りは、和を解析的に求めることができる。図 2.4.2 のように二体間の相互作用を自己無撞着な形で書いた式を Bethe-Salpeter 方程式という。この Bethe-Salpeter 方程式を満たす Γ は超伝導理論との類推からクーペロンと呼ばれる。超伝導の場合との違いは相互作用が静的な不純物ポテンシャルであるため、2 粒子間の振動数が交換されない点にある。

図 2.4.2 の Bethe-Salpeter 方程式は以下で与えられる。

$$\begin{aligned}\Gamma(\mathbf{q}) &= \gamma_0 + \gamma_0 \Pi(\mathbf{q}) \gamma_0 + \gamma_0 \Pi(\mathbf{q}) \gamma_0 \Pi(\mathbf{q}) \gamma_0 + \cdots \\ &= \frac{\gamma_0}{1 - \gamma_0 \Pi(\mathbf{q})}\end{aligned}\quad (2.4.1)$$

ここで Π は

$$\Pi(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} G^R(\mathbf{k}) G^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (2.4.2)$$

である。 γ_0 は Bethe-Salpeter 方程式における既約ダイアグラムで、 n を不純物濃度、 u_0 を不純物ポテンシャルの強度として

$$\gamma_0 = n u_0^2 \quad (2.4.3)$$

である。また $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ である。 $\Pi(\mathbf{q})$ を計算する前に、いくつかの近似を導入する。今 \mathbf{q} が小さい領域を考えているので、

$$E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = E_{\mathbf{k}} + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m} + \frac{q^2}{2m} \sim E_{\mathbf{k}} + v_F \cdot \mathbf{q} \quad (2.4.4)$$

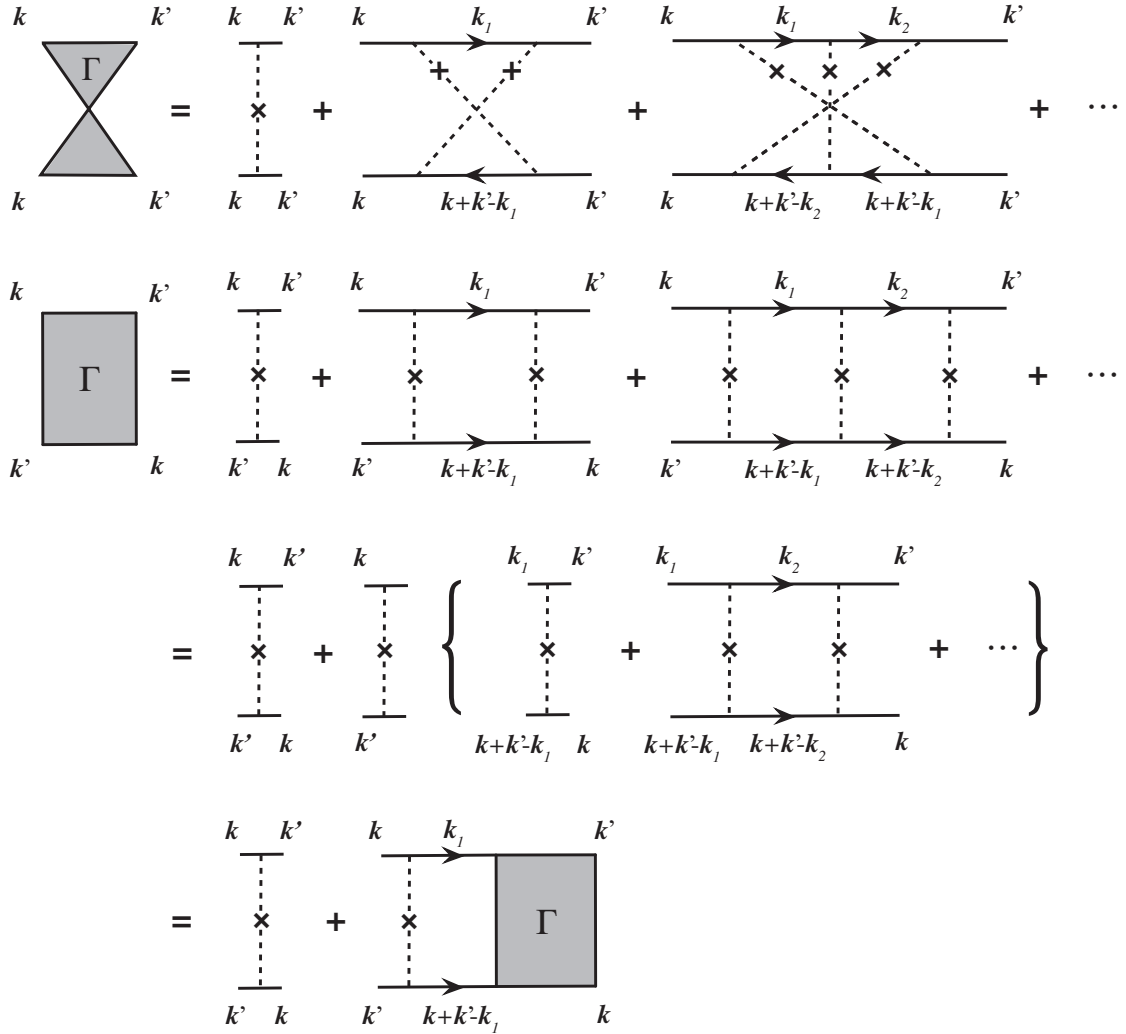


図 2.4.2 Bethe-Salpeter 方程式を表すダイアグラム

が成り立つ。また、伝導に寄与する電子はフェルミ面近傍のものを考えているので (付録 A を参照)。

$$\frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \equiv v_F \quad (2.4.5)$$

とおくことができる。これらを用いると $\Pi(\mathbf{q})$ は

$$\Pi(\mathbf{q}) \sim 2\pi\rho_0\tau(1 - Dq^2\tau) \quad (2.4.6)$$

と計算できる。ただし拡散係数 $D = \frac{1}{2}v_F^2\tau$ を用いた。式 (2.4.6) を式 (2.4.1) に代入すると

Γ は以下のようになる.

$$\Gamma(\mathbf{q}) = \frac{nu_0^2}{\Omega\tau} \frac{1}{Dq^2} \quad (2.4.7)$$

Γ を用いると伝導率の補正項は以下のようになる

$$\delta\sigma = -\frac{e^2\hbar}{\pi\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 k_x k_x G^R(\mathbf{k}) G^A(\mathbf{k}) G^R(-\mathbf{k}) G^A(-\mathbf{k}) \Gamma(\mathbf{q}) \quad (2.4.8)$$

ここで $\Gamma(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ は $\mathbf{k} + \mathbf{k}' \rightarrow 0$ のとき最も大きい寄与を与えることからグリーン関数部分において $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ とおいた. 系が時間反転対称性をもつ場合 $-\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}$ とすることができる. また等方的であること, およびフェルミ面近傍の量が重要であることを用いて, $k_x^2 \sim m^2 v_F^2 / 2$ とおけることに注意すると, \mathbf{k} 積分はグリーン関数にのみ作用し,

$$\sum_{\mathbf{k}} G^R(\mathbf{k})^2 G^A(\mathbf{k})^2 = 4\pi\rho_0\tau^3 \quad (2.4.9)$$

となる. 続いて \mathbf{q} 積分を行う. 長波長極限 $ql \ll 1$ より, カットオフとして上限を平均自由行程 ℓ の逆数, 下限は系のスケール L の逆数とすると局在の効果を評価でき,

$$\sum_{\mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \frac{nu_0^2}{D\tau} \ln \frac{L}{\ell} \quad (2.4.10)$$

となる. したがって, $\delta\sigma$ は最終的に,

$$\delta\sigma = -\frac{e^2}{\pi^2\hbar} \ln \frac{L}{\ell} \quad (2.4.11)$$

となる. 二次元系では電気伝導度の補正が系のスケールの対数依存性を示すことが分かる. これはスケーリング理論によって得られる結果と等しい. またスケーリング理論では分からなかった数係数についても求めることができた. 電気伝導度に対する補正項が頭 \hbar を含むという点からも, 量子補正効果が, まさに量子論的な効果であることが分かる. 量子補正効果は物質によらない普遍的な定数のみで表すことができる点は興味深い. しかし実際には考慮する運動量弾性散乱以外の散乱 (スピン軌道結合効果をもった不純物, 磁性不純物) による緩和時間が式中に現れる. 本研究では特にスピン軌道結合の効果に主眼を置くので次節でスピン軌道結合の効果について論ずる.

2.4.1 スピン軌道結合効果がある場合の量子補正効果の計算

SOC 散乱を考慮した場合の局在の補正効果の計算を行う. Bethe-Salpeter 方程式は以下のようにスピンの依存する形で与えられる.

$$\Gamma_{\alpha\gamma\beta\delta}(\mathbf{q}) = \Gamma_{\alpha\gamma\beta\delta}^0 + \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\alpha\mu\beta\nu}^0 \Pi(\mathbf{q}) \Gamma_{\mu\gamma\nu\delta}(\mathbf{q}) \quad (2.4.12)$$

グリーン関数の中に現れる緩和時間 τ は前節の計算で示されたように $\tau^{-1} \rightarrow \tau_0^{-1} + \tau_{\text{so}}^{-1}$ と置き換えるだけでよい。したがって Π の計算は SOC が無いときと同様で以下のようになる。

$$\Pi(\mathbf{q}) = 2\pi\tau(1 - Dq^2\tau) \quad (2.4.13)$$

ただし

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{\text{so}}} \quad (2.4.14)$$

である。拡散係数は $D = v_F^2\tau/2$ である。有限の膜厚を持つとして、SOC 散乱の三次元成分が有限である場合を考える。散乱の強度に対して、運動量の面に平行な成分 ($\propto \sigma_x, \sigma_y$) が等方的であるとする Γ^0 は以下で与えられる。

$$\Gamma_{\alpha_1\alpha_3\alpha_2\alpha_4}^0(\mathbf{q}) = x\delta_{\alpha_1,\alpha_3}\delta_{\alpha_2,\alpha_4} - y\sigma_{\alpha_3\alpha_1}^z\sigma_{\alpha_2\alpha_4}^z - z(\sigma_{\alpha_3\alpha_1}^x\sigma_{\alpha_4\alpha_2}^x + \sigma_{\alpha_3\alpha_1}^y\sigma_{\alpha_4\alpha_2}^y) \quad (2.4.15)$$

ただし

$$x = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0} \frac{1}{\tau_0} \quad (2.4.16)$$

$$y = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0} \frac{1}{\tau_{\text{so},z}} \quad (2.4.17)$$

$$z = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0} \frac{1}{\tau_{\text{so},x}} \quad (2.4.18)$$

および

$$\frac{1}{\tau_{\text{so},\mu}} = 2\pi n u_0^2 \rho_0 \lambda_{\text{so}}^2 \langle [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}]_\mu^2 \rangle_F \quad (2.4.19)$$

である。式 (2.4.12) においてバーテックス Γ の解の形は、式 (2.4.15) と同様に、 σ に依存しない項と依存する項に分けられると考えられる。よって以下のように仮定できる。

$$\Gamma_{\alpha_1\alpha_3\alpha_2\alpha_4}(\mathbf{q}) = \Gamma_A\delta_{\alpha_1,\alpha_3}\delta_{\alpha_2,\alpha_4} + \Gamma_B\sigma_{\alpha_3\alpha_1}^z\sigma_{\alpha_2\alpha_4}^z + \Gamma_C(\sigma_{\alpha_3\alpha_1}^x\sigma_{\alpha_4\alpha_2}^x + \sigma_{\alpha_3\alpha_1}^y\sigma_{\alpha_4\alpha_2}^y) \quad (2.4.20)$$

式 (2.4.15), (2.4.20) を式 (2.4.12) に代入すると

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha\beta\beta\alpha} = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0} \frac{2}{\tau^2} \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{D_0q^2} + \frac{1}{D_0q^2 + (\frac{2}{\tau_{\text{so},z}} + \frac{2}{\tau_{\text{so},x}})/[1 - (\frac{2\tau}{\tau_{\text{so},z}} + \frac{2\tau}{\tau_{\text{so},x}})]} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{D_0q^2 + \frac{4}{\tau_{\text{so},x}} / (1 - \frac{4\tau}{\tau_{\text{so},x}})} \right\} \quad (2.4.21) \end{aligned}$$

となる．電気伝導度に対する SOC を含む量子補正は式 (2.4.21) を式 (2.4.8) に代入すると，

$$\delta\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left[\log \frac{\ell^{-2} + \ell_{\text{so},z,x}^{-2}}{L^{-2} + \ell_{\text{so},z,x}^{-2}} - \frac{1}{2} \log \frac{\ell^{-2}}{L^{-2}} + \frac{1}{2} \log \frac{\ell^{-2} + \ell_{\text{so},x}^{-2}}{L^{-2} + \ell_{\text{so},x}^{-2}} \right] \quad (2.4.22)$$

となる．ここで

$$\ell_{\text{so},z,x}^{-2} = \frac{\frac{2}{\tau_{\text{so},z}} + \frac{2}{\tau_{\text{so},x}}}{D_0 \left\{ 1 - \left(\frac{2\tau}{\tau_{\text{so},z}} + \frac{2\tau}{\tau_{\text{so},x}} \right) \right\}} \quad (2.4.23)$$

$$\ell_{\text{so},x}^{-2} = \frac{\frac{4}{\tau_{\text{so},x}}}{D_0 \left\{ 1 - \frac{4\tau}{\tau_{\text{so},x}} \right\}} \quad (2.4.24)$$

とおいた．

式 (2.4.22) において τ_{so}^{-1} が 0 になるときは第二項目と第三項目が互いに打ち消し，第一項目が通常の弱局在効果を与える．一方 τ_{so}^{-1} が有限のときは第一項目と第三項目の発散が抑えられ，第二項目の寄与が主要になる．このときの符号は通常の弱局在の場合と逆符号で入るために弱反局在効果を与えることがわかる．一般に系がもつ普遍的対称性に依じてハミルトニアンは Altrand-Zirnbauer (AZ) の 10 個のユニバーサリティクラスに分類される [7]. $\tau_{\text{so},x,y}^{-1}$ が有限のときは SOC を含むハミルトニアンに対する時間反転演算子 Θ に対して， $\Theta^2 = -1$ となる．このときを AZ の分類ではクラス AII (またはシンプレクティック) と呼ぶ．その他の AII クラスとしてディラック方程式と同型のハミルトニアンがあり，第 1 章で示したように時間反転演算子の二乗は $\Theta^2 = -1$ となる．このような系では一般に弱反局在が生じうる．SOC が存在する場合でも $\tau_{\text{so},x,y}^{-1} = 0$ のときは，スピンスピンを伴わずハミルトニアンが σ_z と交換する．このときは時間反転演算子はスピンスピン系のもものと実効的に等しく $\Theta^2 = 1$ となる．このときをクラス AI (オルソゴナル) とよぶ．磁性不純物がある場合 (時間反転対称性を破る場合) はクラス A (ユニタリー) である．

2.4.2 クーペロンの成分と拡散方程式

前節では Bethe-Salpeter 方程式を満たす Γ を仮定し代入法により解いた．もう一つの解き方として Γ を対角化する方法がある．この方法は物理的な意味を捉えやすく代入法よりも計算量が少なく済む．Bethe-Salpeter 方程式を対角化後，位置表示に移ることによりクーペロンが拡散方程式を満たす準粒子であることを見る． Γ の行列表示の基底を $(\langle \alpha_4 | \otimes \langle \alpha_3 |) \hat{\Gamma} (| \alpha_1 \rangle \otimes | \alpha_2 \rangle)$ とする． $\alpha = \{\uparrow, \downarrow\}$ である．式 (2.4.20) に \uparrow, \downarrow を代入するこ

とで

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \Gamma_A + \Gamma_B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\Gamma_C & \Gamma_A - \Gamma_B & 0 \\ 0 & \Gamma_A - \Gamma_B & 2\Gamma_C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Gamma_A + \Gamma_B \end{bmatrix} \quad (2.4.25)$$

となる。また $\hat{\Gamma}^0$ は

$$\hat{\Gamma}^0 = \begin{bmatrix} x - y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2z & x + y & 0 \\ 0 & x + y & 2z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x - y \end{bmatrix} \quad (2.4.26)$$

である。二つのスピンのテンソル積の基底から多重項の基底に移るにはクレプシュゴルダン係数 U を用いれば良い [91]。 U は

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.4.27)$$

である。この U を用いると Γ , Γ^0 は対角化されスピン三重項と一重項に対応するクーペロンが得られる。これらは以下ようになる。

$$U^\dagger \Gamma U = \begin{bmatrix} \Gamma^1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma^3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Gamma^4 \end{bmatrix} \quad (2.4.28)$$

$$U^\dagger \Gamma^0 U = \begin{bmatrix} \Gamma^{01} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma^{02} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma^{03} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Gamma^{04} \end{bmatrix} \quad (2.4.29)$$

ここで

$$\Gamma^1 = \Gamma_A + \Gamma_B \quad (2.4.30)$$

$$\Gamma^2 = \Gamma_A - \Gamma_B + 2\Gamma_C \quad (2.4.31)$$

$$\Gamma^3 = \Gamma_A - \Gamma_B - 2\Gamma_C \quad (2.4.32)$$

$$\Gamma^4 = \Gamma_A + \Gamma_B \quad (2.4.33)$$

および

$$\begin{aligned}\Gamma^{01} &= \Gamma^{04} = \frac{1}{2\pi\rho_0} \left(\frac{1}{\tau_0} - \frac{1}{\tau_{\text{so},z}} \right) \\ \Gamma^{02} &= \frac{1}{2\pi\rho_0} \left(\frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{\text{so},z}} - \frac{2}{\tau_{\text{so},x}} \right) \\ \Gamma^{03} &= \frac{1}{2\pi\rho_0} \left(\frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{\text{so},z}} + \frac{2}{\tau_{\text{so},x}} \right)\end{aligned}\quad (2.4.34)$$

とおいた． $l = 1, 2, 4$ が三重項に対応し， $l = 3$ が一重項である． $\Pi(\mathbf{q})$ のフーリエ変換は，

$$\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{q}} \Pi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (2.4.35)$$

となる．これを用いて式 (2.4.12) を変形すると，対角化された位置表示の Bethe-Salpeter 方程式は，

$$\begin{aligned}\Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \Gamma^{0l} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Gamma^{0l} \int d\mathbf{r}'' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \Gamma^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \\ &\sim \Gamma^{0l} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Gamma^{0l} \left[\Pi(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Pi(\mathbf{q})}{\partial q^2} (i\nabla)^2 \right] \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\end{aligned}\quad (2.4.36)$$

となる．ただしここで，

$$\begin{aligned}\Gamma^l(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') &= \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \nabla \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r}) + \frac{1}{2} \nabla^2 \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r})^2 + \dots \\ &= e^{(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \cdot \nabla} \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\end{aligned}\quad (2.4.37)$$

という関係を用いた．式 (2.4.36) を $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ について解くと，

$$[-D_0 \nabla^2 + \tau_l^{-1}] \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2\pi\rho_0 \tau^2} \quad (2.4.38)$$

となる．ここで τ_l^{-1} を

$$\begin{aligned}\tau_1^{-1} &= \tau_4^{-1} = \frac{\frac{2}{\tau_{\text{so},z}} + \frac{2}{\tau_{\text{so},x}}}{1 - \frac{2\tau}{\tau_{\text{so},z}} - \frac{2\tau}{\tau_{\text{so},x}}}, \\ \tau_2^{-1} &= \frac{\frac{4}{\tau_{\text{so},x}}}{1 - \frac{4\tau}{\tau_{\text{so},x}}}, \quad \tau_3^{-1} = 0\end{aligned}\quad (2.4.39)$$

とおいた． $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は拡散方程式のグリーン関数に対応することが分かる．クーペロンのエネルギー分散関係は $Dq^2 + \tau_l^{-1}$ である．電流-電流相関の中に電子とは異なる“粒子”が潜んでいたことは，グリーン関数の階層性を反映していることに他ならない．これは相互作用がある場合の一粒子グリーン関数が，多粒子グリーン関数を用いて再帰的に表されること，

および多粒子グリーン関数をもつ結節部分 Γ の極が準粒子の励起スペクトルを表すことから理解できる [2]. ただし相互作用はクーロン相互作用のような二体相互作用ではなく, 不純物相互作用であり一粒子問題である. 元を辿れば電流-電流相関は一粒子グリーン関数の積 ($G^R G^A$) であったが, 不純物平均を取ることで二体間相互作用が生じ Γ が現れたのである [6].

τ_l^{-1} は式 (2.4.38) の形からクーペロンの静止質量項, つまり励起ギャップに対応することが分かる. 三重項は SOC 散乱が強くなると励起ギャップが増大する一方で, 一重項は常にギャップレスである. この τ_l^{-1} は節 2.4.1 で求めた結果と一致する. $1 - 2\tau/\tau_{\text{so},z} - 2\tau/\tau_{\text{so},x}$, $1 - 4\tau/\tau_{\text{so},x}$ は τ_{so}^{-1} が τ_0^{-1} に比べて十分小さいとき, 1 と置くことができる. HLN の理論の中ではこの近似が用いられている. この近似を用いない場合, 三重項の励起ギャップは τ_{so}^{-1} が τ_0^{-1} よりも大きいときに負になる.

2.5 磁気伝導度に対する量子補正効果

磁場の効果は時間反転対称性を破るため干渉効果は弱められる. 磁場中において電子の運動量はゲージ不変性より $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - e\mathbf{A}$ と変更される. $\Gamma(\mathbf{q})$ のもつ運動量は $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ であるので $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} - 2e\mathbf{A}$ と置き換えれば良い. このとき式 (2.4.38) は

$$[D_0(-i\nabla - 2e\mathbf{A})^2 + \tau_l^{-1}] \Gamma^l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2\pi\rho_0\tau^2} \quad (2.5.1)$$

となる. この運動方程式の形は調和振動子と同じである. よって $D_0(-i\nabla - 2e\mathbf{A})^2 \rightarrow \frac{4eD_0H}{ch}(n + 1/2)$ などと置き換え, ランダウ準位の和を取れば良い. より厳密な磁場中における電子-電子対伝搬関数の計算方法は文献 [8, 70, 106] に詳しい.

スピン軌道結合散乱存在下における磁気伝導度の弱局在補正効果は, 結果のみを示すと

$$\begin{aligned} \delta\sigma(B) = & -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left[\alpha_1 \left\{ \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_0^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_{\text{so}}^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{4}{3}\frac{\ell_B^2}{\ell_{\text{so}}^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) \right\} \right. \\ & \left. + \alpha_2 \left\{ \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_{\text{so}}^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

となる. ここで ℓ_ϕ は位相緩和長でパラメータである. 二電子対の磁氣的長さを $\ell_B = \sqrt{\hbar/4eB}$ とおいた. ℓ_{so} はスピン軌道長で $\ell_{\text{so}} = \sqrt{D_0\tau_{\text{so}}}$ である. $\Psi(z)$ はディガンマ関数であり, 以下の級数表示をもつ.

$$\Psi(z) = -\gamma - \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n+z} - \frac{1}{n+1} \right) \quad (2.5.3)$$

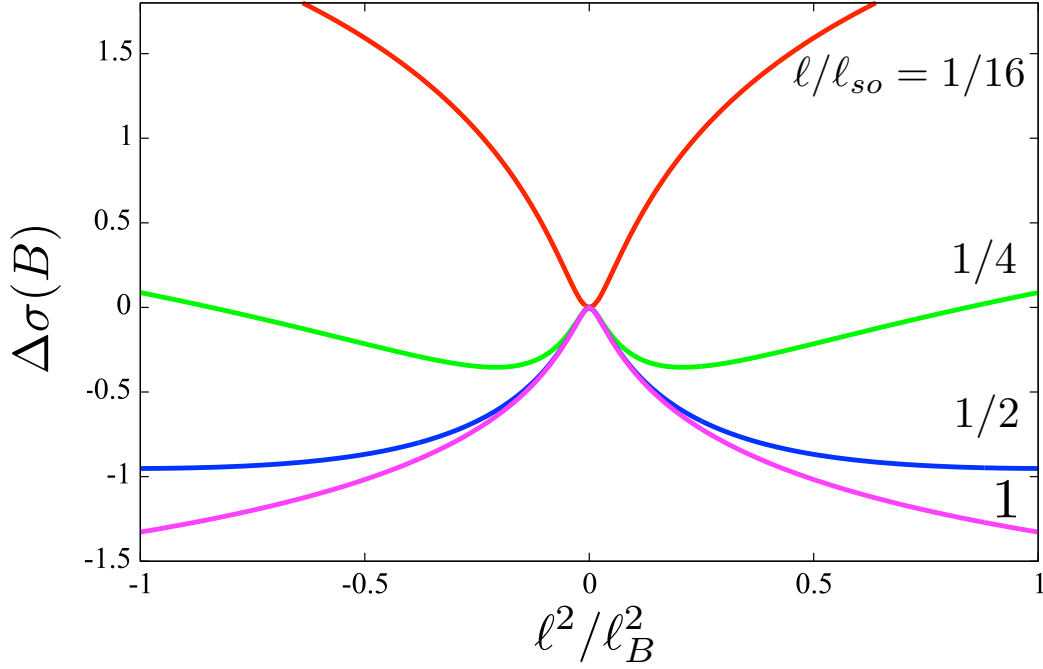


図 2.5.1 磁気伝導度の磁場依存性. $\Delta\sigma(B) = [\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)]/(e^2/2\pi^2\hbar)$ とした. $\ell/\ell_{so} = 1/16, 1/4, 1/2, 1$ としてプロットした.

$\gamma = 0.577216\dots$ はオイラー定数である. $\alpha_1 = 3/2$, $\alpha_2 = 1/2$ である. SOC 散乱が弱いときは $\Delta\sigma(B) > 0$ となる弱局在が起きるが, SOC 散乱が強いときは $\Delta\sigma(B) < 0$ となる弱反局在が起きる. 磁場領域ごとのふるまいは以下のように定性的に理解できる: 低磁場では励起ギャップをもつ三重項よりも励起ギャップがゼロである一重項が優勢になる. その結果弱反局在が起きる [64]. 高磁場領域ではクーペロンの軌道運動が増大し, 励起ギャップの効果が見えなくなる. このため, 励起ギャップをもっていた 3 つある三重項が一重項に勝ち弱局在が起きる. 以上より HLN の理論に従うような系では磁気伝導度は必ず極値を持つこと, および低磁場では SOC の強さに依らず磁気伝導度が同じ曲線にのり, 曲線の傾きが一定 (低磁場では一重項が優勢であり, 一重項は SOC の効果を受けないので) であることが分かる. この感覚は弱局在の実験データを解釈する際に重要である. 温度を除く外部パラメータを変化させたとき, 曲線の傾き α が変化している場合は HLN 公式を超えた理論的枠組みが必要であることを意味する. 一般に α は考えている系によって様々な要因で変化する. 例として Si-MOS の反転層ではバレー間の散乱強度が α を変化させる [42]. トポロジカル絶縁体では二つの表面伝導チャネルの混成を反映する [11, 19]. HLN 公式を用いて解析を行う場合は α

はフィッティングパラメータとする場合が多い [3, 5, 12, 20, 22, 62]. 次節にここでは説明できなかった弱局在理論について概観する.

2.6 その他の弱局在効果に関する理論

ここまでは主に HLN 理論について見てきた. HLN 理論とは大雑把に言うと, 「(i) 時間空間反転対称性を有する (ii) 1 バンド, 1 バレー自由電子に対して SOC 項を (iii) 摂動的に扱った場合」の弱局在理論であるといえる. 空間反転対称性を有しない系においてはドレesselハウス型の SOC [25], もしくはラシュバ型の SOC [17] が生じる. このような系における弱局在効果は Iordanskii, Lyanda-Geller, Pikus 理論によって説明される [59, 64]. (ii) 複数のバンド, もしくはバレーをもつ系として例えば, シリコン [42], グラフェン [10, 81, 100, 111, 112], トポロジカル絶縁体 [76, 93, 102]. 遷移金属ダイカルコゲナイド [77, 85], ワイル半金属 [75] における弱局在理論が調べられている.

2.7 実験について

弱反局在効果はこれまで多くの物質で実験的に確認されてきた. Bergman による Au が付加された Mg 薄膜の実験の図を 2.7.1 に示す [13]. Au は HLN 理論における SOC が強い不純物として見なせる. Au が 0% のときは $(\tau_{so})^{-1} = 0$ に対応し, 量子補正効果は三重項のみをもつため WL が起きる. Au を付加していくと $(\tau_{so})^{-1}$ が有限となり, 低磁場においては一重項の寄与が支配的となり WAL が起きる. 高磁場になると, 三重項の寄与により WL が起きている. また Au 付加の量に対する低磁場での傾き (一重項の係数 α) は常に一定であることが分かる. この結果は HLN の式と非常に良い一致をしている. HLN 公式を用いたスピン緩和長, 位相緩和長を評価手法を弱局在解析と呼ぶ [13, 20, 73, 83, 104].

図 2.7.2(a) は Bi 薄膜における弱反局在効果の実験である [3]. これまで説明したように HLN 理論では弱磁場領域の主要な寄与は一重項のクーペロンである. その傾きを定める α は HLN 理論では $\alpha = -1/2$ である. しかし図 2.7.2. (b) および (c) を見て分かるように膜厚に依存する. 実験的には α を現象論的にフィッティングパラメータとして決定している.

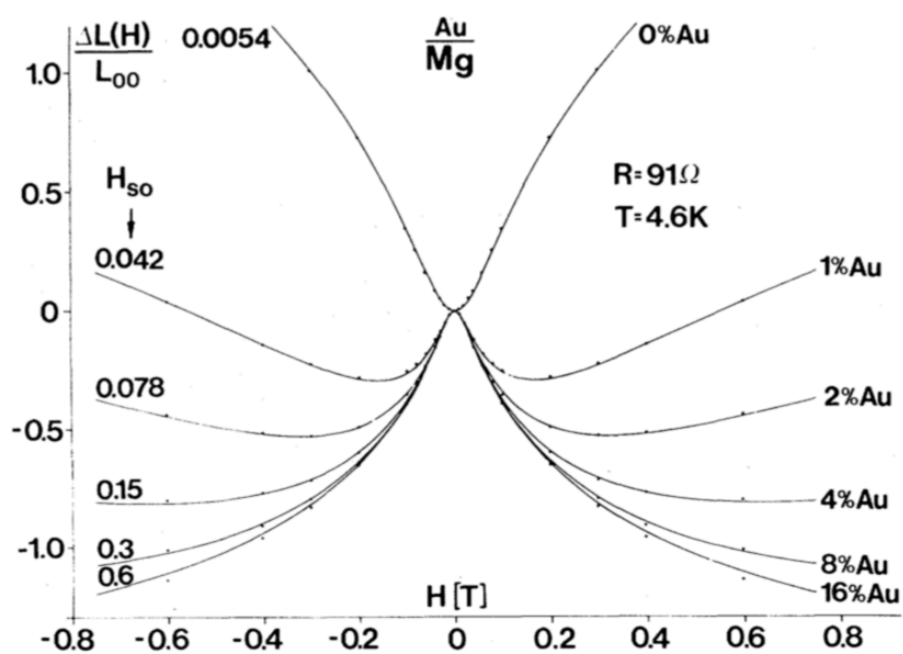


図 2.7.1 Au を付加した Mg の磁気伝導度 (文献 [13] より引用). 実線が HLN 公式を表す.

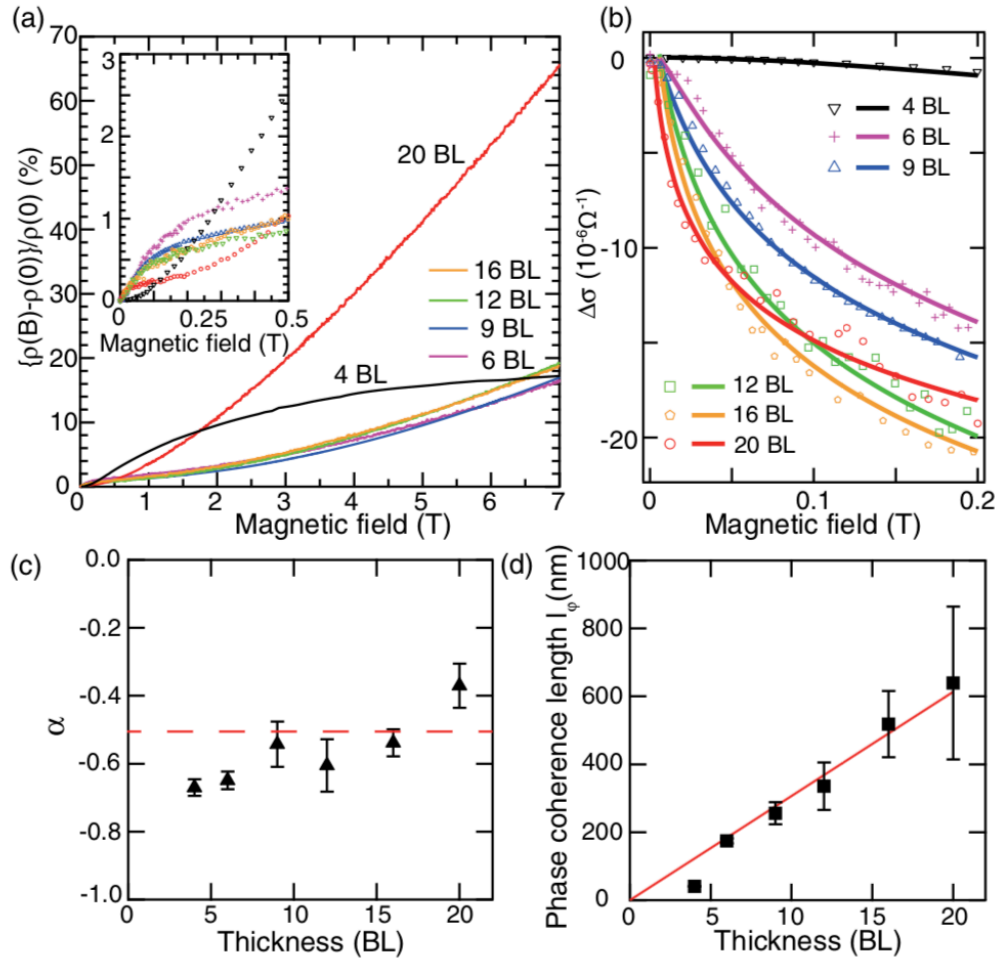


図 2.7.2 Bi(111) 薄膜における弱局在解析の実験 (文献 [3] より引用). 0.8K における規格化された磁気抵抗 $\{\rho(B) - \rho(0)\} / \rho(0)$ を磁場に対してプロットしてある. 挿入図は低磁場領域における拡大図である. 膜厚は 4 バイレイヤー (BL), 6BL, 9BL, 12BL, 16BL, 20BL である. (b): 磁気抵抗のデータである (a) に対して, HLN 公式 (実線) のフィッティング. フィッティングにより見積もられた (c): 一重項の強さの係数 α , (d): 位相緩和長 l_ϕ .

第3章 スピン軌道結合格子における弱反局在の理論

3.1 研究背景

よく知られているように二次元系において SOC をもつ不純物による散乱は弱反局在 (WAL) を引き起こす。これは Hikami-Larkin-Nagaoka (HLN) 理論により説明される [54]。スピン緩和長は HLN による公式を用いて電気伝導度に対する量子補正効果の磁場依存性の解析により評価することができる。HLN 公式は金属中の自由電子と不純物による SOC 散乱によるスピン緩和の効果を考えている。これは例えば Cu 薄膜中に Au 原子が付加されたような状況である (図. 3.1.1(a))。このような状況は、“希薄 SOC 系”とみなすことができる。

近年は HLN 公式を用いたスピン緩和長の評価はスピントロニクスやトポロジカル物質の分野において重要性を増してきている [12, 22, 49, 87]。これらの分野において関心がもたれる物質は、概して結晶を構成する原子それ自体が強い SOC をもつような状況であり、不純物 SOC は弱い。これは例えば Bi 薄膜のような状況であり (図. 3.1.1(b))、いわば“SOC 格子”と解釈することができる。これは希薄 SOC 系の反対側の極限である。HLN 公式は SOC 格子系も希薄 SOC 系と同様の枠組みで説明できるという仮定のもと、多くの SOC 格子系に適用されてきた [3, 12, 19, 22]。しかし HLN 公式を SOC 格子系に適用することの妥当性は未だ不明確である。素朴に考えれば、SOC 系では次の二つの可能性がある: (i) 希薄 SOC 系と同様に SOC 格子自体の SOC によって WAL が起きる。 (ii) 希薄 SOC 系の反対側の極限であるために WL が起きる。これらはどちらが正しいか明らかではない。同様の希薄系と格子系の問題は近藤効果で知られている。近藤効果の場合は希薄近藤系と同じように、近藤格子系でも電気抵抗極小が生じる [97, 99]。

本研究では二次元 SOC 格子系において従来の WAL が生じるかどうか、伝導度に対する量子補正効果の計算を行うことで調べた。我々は SOC 格子系の低エネルギー有効模型である Wolff ハミルトニアンを用いた。Wolff ハミルトニアンはディラックハミルトニアンと数

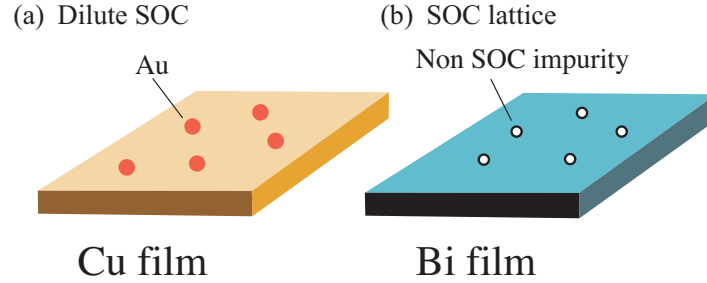


図 3.1.1 希薄 SOC 系と SOC 格子系の概略図. (a) 希薄 SOC 系, (b) SOC 格子系の概略図.

学的に等価な模型である [21, 47, 108]. 量子補正効果は粒子-粒子間の梯子型の散乱, すなわちクーパーチャンネルの不安定性と同様に考えることで考慮できる. 結果として, SOC 格子系においてフェルミエネルギーとバンドギャップの比によって WAL-WL クロスオーバーが生じることが分かった. WAL 領域において希薄 SOC 系と SOC 格子系の両者に本質的な違いが現れる. 希薄 SOC 系では電気伝導度の磁場依存性に明確な極値が生じるが, 一方 SOC 格子系では極値は生じない. HLN 理論では WAL が生じるためには, スピンスピンを伴うポテンシャルを考慮する必要があった. しかし SOC 格子系では, スピンスピンを伴うポテンシャルを考慮しなくとも WAL が生じることが明らかになった. この非従来型の WAL には SOC のバンド間効果による, バンド間一重項のクーペロンが寄与していることを明らかにした. 最後に Bi-Sb 合金と圧力下での PbTe における実験について議論する.

3.2 伝導度に対する量子補正効果

Wolff ハミルトニアンは SOC 効果を相対論的に含む強結晶 SOC 系物質の有効模型である. 今回の計算では簡便性のため等方的な分散をもつ模型を考える. 同バンド, 同スピン間の不純物散乱を含んだ二次元の等方的 Wolff ハミルトニアンは以下のような 4×4 の行列で与えられる

$$\mathcal{H}_W = \mathcal{H}_0 + V(\mathbf{r}) \quad (3.2.1)$$

$$\mathcal{H}_0 = \begin{bmatrix} \Delta & i\hbar\gamma\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ -i\hbar\gamma\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & -\Delta \end{bmatrix} \quad (3.2.2)$$

\hbar は換算プランク定数, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ は波数ベクトル, 2Δ はバンドギャップ, γ は速度, $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列である. Wolff ハミルトニアンの基底は $(|c \uparrow\rangle, |c \downarrow\rangle, |v \uparrow\rangle, |v \downarrow\rangle)$ である. こ

ここで $c/v \uparrow$, $c/v \downarrow$ は $\mathbf{k} = 0$ における伝導帯, 価電子帯のスピンを表す (厳密には \uparrow, \downarrow は時間空間反転対称性を有するときのクラマース二重項のスピン自由度を表すが本論文では単にスピンと呼ぶ). 不純物ポテンシャルは短距離型を考え,

$$V(\mathbf{r}) = u_0 \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.2.3)$$

とする. $V(\mathbf{r})$ はバンドとスピンを変えない対角的なものを考慮する. しかし, 電子の固有状態は SOC によってバンドとスピンがそれぞれ混ざったものとなる. u_0 は散乱の強さ, \mathbf{R}_i は i 番目の不純物の位置を指定する. 運動量緩和時間は最低次のボルン近似を考えると

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2\tau} &= \pi \sum_{\mathbf{k}'} \langle | \langle i, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | i, \mathbf{k}' \rangle |^2 \rangle_{\text{imp}} \delta(E_F - E_{\mathbf{k}'}) \\ &= \pi \rho_0 n_i u_0^2 \frac{\lambda^2 + 1}{2\lambda^2} \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

と求まる. エネルギー固有状態 $|i, \mathbf{k}\rangle$ は式 (1.3.29)-(1.3.32) を用いた. $\lambda = E_F/\Delta$ とおいた. ρ_0 は状態密度, n_i は単位体積あたりの不純物濃度である. また $E_F > 0$ と仮定する. ここで不純物散乱の過程においてエネルギー固有状態を変えないことを考慮している. なぜならば $\langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 2, \mathbf{k}' \rangle = \langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 3, \mathbf{k}' \rangle = 0$ となるからである. ただし 1 から 4 への遷移確率は $\langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 4, \mathbf{k}' \rangle \neq 0$ である. この過程は良い金属の条件, $(E_F\tau \gg 1)$ が満たされているときには電気伝導度の量子補正効果に対して $(E_F\tau)^{-1}$ のオーダーとなるため無視できる. この詳細は後に述べる.

電気伝導度に対する量子補正 $\delta\sigma_W(L)$ は久保公式より [32, 43, 71],

$$\delta\sigma_W = \frac{\hbar e^2}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^x v_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^x G_{\mathbf{k}}^R G_{\mathbf{k}}^A G_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^R G_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^A \quad (3.2.5)$$

ただし W は Wolff を表す. $G^{R/A}$ はグリーン関数で $G^{R/A} = (E_F - E_{\mathbf{k}} \pm i\hbar/2\tau)^{-1}$ である. $\Gamma(\mathbf{q})$ は粒子-粒子間の無限次の不純物散乱を表しており, クーペロンを与える. $v_{\mathbf{k}}$ は電子の速度で, ハミルトニアン H_0 の波数微分により, $v_{\mathbf{k}} = \langle 1, \mathbf{k} | \partial H_0 / \partial \mathbf{k} | 1, \mathbf{k} \rangle = \gamma \sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^2} / E_{\mathbf{k}} \cos \phi_{\mathbf{k}}$ と与えられる. $\Gamma(\mathbf{q})$ は以下の Bethe-Salpeter 方程式を満たす.

$$\Gamma(\mathbf{q})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0 + \sum_{\mathbf{k}''} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}''}^0 G_{\mathbf{k}''}^R G_{\mathbf{q}-\mathbf{k}''}^A \Gamma(\mathbf{q})_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'} \quad (3.2.6)$$

Γ^0 は以下で与えられる.

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0 &= \langle \langle i, \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | i, \mathbf{k} \rangle \langle i, -\mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | i, -\mathbf{k} \rangle \rangle_{\text{imp}} \\ &= \frac{1}{2\pi\rho_0\tau} \left[\gamma_0 + \gamma_1 e^{i(\phi-\phi')} + \gamma_2 e^{2i(\phi-\phi')} \right] \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

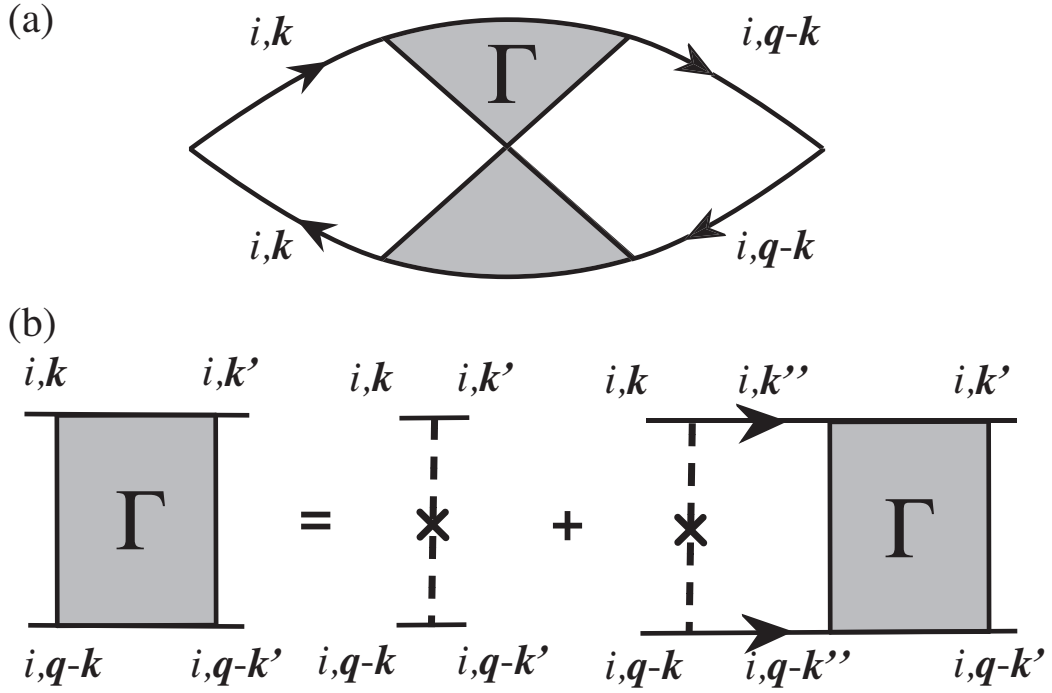


図 3.2.1 ダイアグラム. (a) 電気伝導度に対する量子補正効果, (b) Bethe-Salpeter 方程式.

となる．ここで，弾性散乱であること，フェルミエネルギー近傍の波数が重要であることを用いて，

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= \frac{1}{1 + X_{\mathbf{k}_F}^4}, \quad \gamma_1 = \frac{2X_{\mathbf{k}_F}^2}{1 + X_{\mathbf{k}_F}^4}, \\ \gamma_2 &= \frac{X_{\mathbf{k}_F}^4}{1 + X_{\mathbf{k}_F}^4}, \quad X_{\mathbf{k}_F} = \frac{\sqrt{E_F^2 - \Delta^2}}{\Delta + E_F}\end{aligned}\quad (3.2.8)$$

$$N_{\mathbf{k}} = N_{\mathbf{k}'} = N_{\mathbf{k}_F}, \quad X_{\mathbf{k}} = X_{\mathbf{k}'} = X_{\mathbf{k}_F} \quad (3.2.9)$$

とおいた．

$\Gamma(\mathbf{q})$ が $\Gamma \langle \langle 1, \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | 4, \mathbf{k} \rangle \langle 1, -\mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | 1, -\mathbf{k} \rangle \rangle_{\text{imp}}$ のように異なるエネルギー固有状態間の行列要素をもつ場合， $\delta\sigma$ におけるグリーン関数部分は

$$\rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^{\text{R}} | 4, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^{\text{R}} | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^{\text{A}} | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^{\text{A}} | 1, -\mathbf{k} \rangle = \frac{\rho_0 \pi i \tau^2}{E_F} \quad (3.2.10)$$

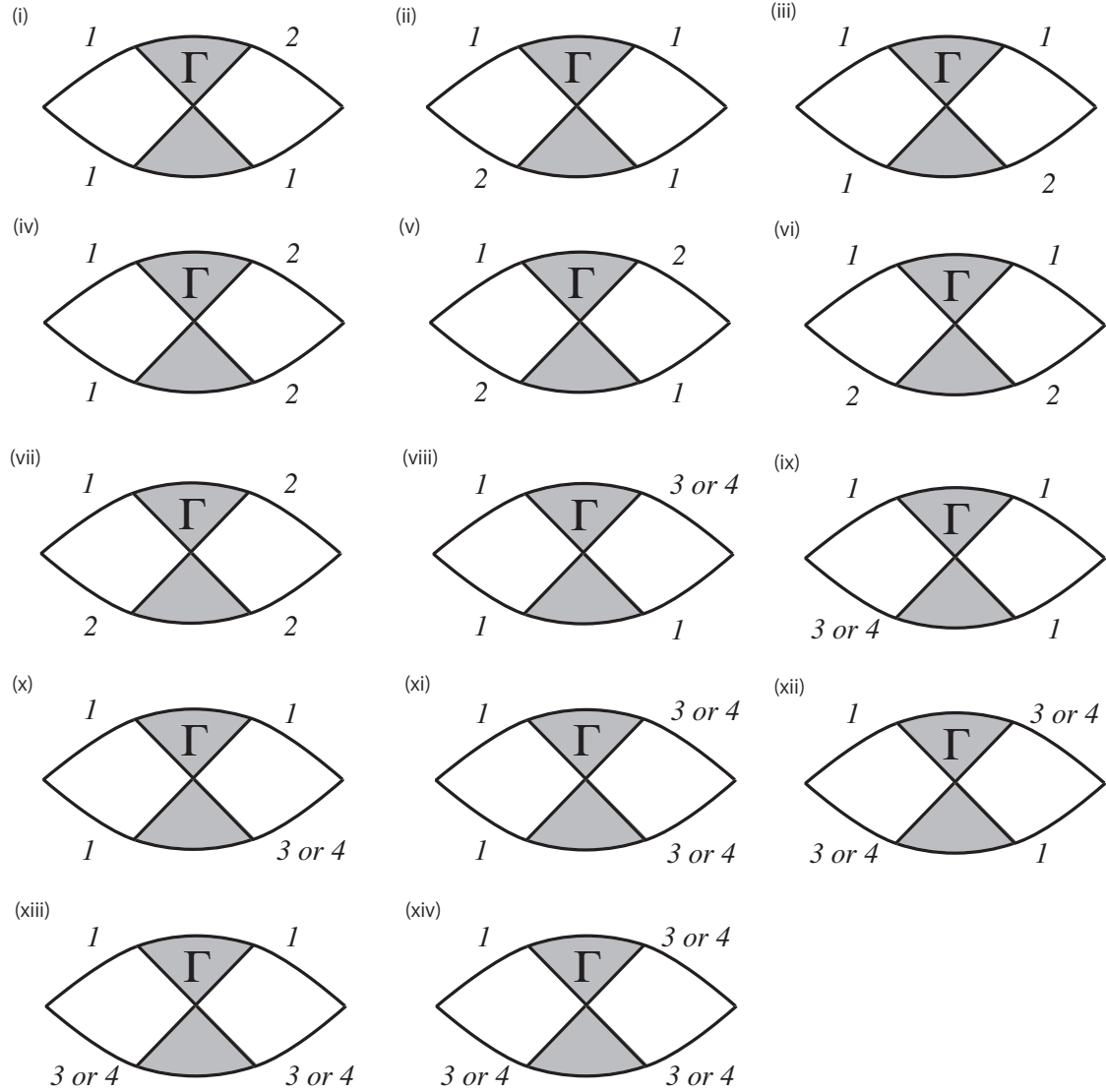


図 3.2.2 量子補正効果に寄与しないダイアグラム．1 ～ 4 はエネルギー固有状態 $|i, \mathbf{k}\rangle$ の i を表す．(i)～(iii), (v)～(vii) 速度行列要素によりゼロとなる．(iv) Bethe-Salpeter 方程式の不純物散乱の行列要素 (式 (3.2.7)) によりゼロとなる．(viii)～(xiv) 良い金属が満たされているとき無視できる．1 と 2 を入れ替えた場合も同様である．

となる．この過程は同じ固有状態間の行列要素をもつ場合，

$$\rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 1, -\mathbf{k} \rangle = 4\pi\rho_0\tau^3 \quad (3.2.11)$$

に比べて $(E_F\tau)^{-1}$ で小さい．同様にしてその他の過程，

$$\begin{aligned} \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 4, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, \mathbf{k} \rangle \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 1, -\mathbf{k} \rangle &= -\frac{\rho_0\pi i\tau^2}{E_F} \\ \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, -\mathbf{k} \rangle &= -\frac{\rho_0\pi i\tau^2}{E_F} \\ \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 4, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, -\mathbf{k} \rangle &= \frac{\rho_0\pi\tau}{E_F^2} \\ \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 4, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 4, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, \mathbf{k} \rangle \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 1, -\mathbf{k} \rangle &= \frac{\rho_0\pi\tau}{E_F^2} \\ \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 1, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 4, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, \mathbf{k} \rangle \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, -\mathbf{k} \rangle &= \frac{\rho_0\pi\tau}{E_F^2} \\ \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^R | 4, -\mathbf{k} \rangle \langle 1, \mathbf{k} | \hat{G}^R | 1, \mathbf{k} \rangle \langle 4, \mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, \mathbf{k} \rangle \langle 4, -\mathbf{k} | \hat{G}^A | 4, -\mathbf{k} \rangle &= \frac{\rho_0\pi i\tau^2}{E_F} \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

はすべて無視できる．また速度行列要素に対して $\langle 1, \mathbf{k} | \hat{v} | 2, \mathbf{k} \rangle = 0$ が成り立つことを考慮すると $|1, \mathbf{k}\rangle$, $|2, \mathbf{k}\rangle$ が混合する過程も無視できる．図 3.2.2 に量子補正効果に寄与しないダイアグラムをまとめた．結果として，異なるエネルギー固有状態間の散乱過程は無視することができる．この近似は文献 [76, 93] と本質的に等価である．ただし，Bethe-Salpeter 方程式を解く過程においては異なるエネルギー固有状態間の散乱過程の寄与も取り込まれる可能性がある．この効果について第4章で議論した．

Bethe-Salpeter 方程式 (3.2.6) の解は，式 (3.2.7) と同様に $e^{i(n\phi - m\phi')}$ に比例した形になると考えられる．よって以下のように解を仮定する [76, 93]．

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{2\pi\rho_0\tau} \sum_{n,m} \Gamma_{nm} e^{i(n\phi - m\phi')}, \quad (3.2.13)$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0 = \frac{1}{2\pi\rho_0\tau} \sum_{n,m} \Gamma_{nm}^0 e^{i(n\phi - m\phi')}. \quad (3.2.14)$$

$E_{\mathbf{k}}$ 積分は

$$\int dE_{\mathbf{k}} G^R(\mathbf{k}'') G^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}'') = \frac{2\pi\tau}{1 + i\tau\mathbf{v}_F'' \cdot \mathbf{q}} \quad (3.2.15)$$

である。

$$\Gamma_{nm} = \Gamma_{nm}^0 + \sum_{n'm'} \left\langle \frac{e^{i(n'-m')\phi''}}{1 + i\tau \mathbf{v}_F'' \cdot \mathbf{q}} \right\rangle_F \Gamma_{nm'}^0 \Gamma_{n'm} \quad (3.2.16)$$

$$\Pi_{m'n'} = \left\langle \frac{e^{i(n'-m')\phi''}}{1 + i\tau \mathbf{v}_F'' \cdot \mathbf{q}} \right\rangle_F \quad (3.2.17)$$

とおけば,

$$\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^0 + \hat{\Gamma}^0 \hat{\Pi} \hat{\Gamma} \quad (3.2.18)$$

と行列で表すことができる。ただし $\langle \dots \rangle_F$ はフェルミ面における角度平均である。また

$$\hat{\Gamma}^0 = \begin{bmatrix} \gamma_0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_2 \end{bmatrix}, \quad (3.2.19)$$

$$\hat{\Pi} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{2}Q^2 & -\frac{i}{2}Q_+ & -\frac{1}{4}Q_+^2 \\ -\frac{i}{2}Q_- & 1 - \frac{1}{2}Q^2 & -\frac{i}{2}Q_+ \\ -\frac{1}{4}Q_-^2 & -\frac{i}{2}Q_- & 1 - \frac{1}{2}Q^2 \end{bmatrix} \quad (3.2.20)$$

および,

$$Q_+ = Q_x + iQ_y, \quad Q_- = Q_x - iQ_y \quad (3.2.21)$$

$$Q_x = |v_F| \cos \phi'' q_x, \quad Q_y = |v_F| \sin \phi'' q_y \quad (3.2.22)$$

とおいた。 Γ_{nm} について解くと

$$\Gamma_{00} = \frac{\alpha_t}{(\ell_t^{-2} + q^2)} \quad (3.2.23)$$

$$\Gamma_{11} = \frac{\alpha_s}{(\ell_s^{-2} + q^2)} \quad (3.2.24)$$

ここで $\ell_t^{-2} = (\lambda - 1)^2 / (\lambda + 1)^2 \alpha_t \ell_0^{-2}$, $\ell_s^{-2} = 2 / (\lambda^2 - 1) \alpha_s \ell_0^{-2}$ とおいた。 $\ell_0 = \sqrt{D_0 \tau}$ は平均自由行程, $D_0 = v_F^2 \tau / 2$ は拡散定数, $v_F = \gamma \sqrt{E_F^2 - \Delta^2} / E_F$ はフェルミ速度である。 α_t と α_s はそれぞれ三重項と一重項のクーパー不安定性の強度を与える重要なパラメータで、それぞれ

$$\alpha_t = \frac{4}{\lambda^2 + 3}, \quad \alpha_s = -\frac{(\lambda^2 - 1)^2}{2(\lambda^2 + 1)^2}. \quad (3.2.25)$$

となる． Γ_{22} は発散的な寄与をしないので無視する．また Γ_{nm} の非対角成分は q 積分の角度積分を行うことですべてゼロになる．以上よりクーペロンは

$$\Gamma(\mathbf{q}) = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0\tau} (\Gamma_{00} - \Gamma_{11}) \quad (3.2.26)$$

となる．

Γ_{nm} は $\Gamma(\mathbf{q})_{\mathbf{k}_\alpha \mathbf{k}_\beta}$ を多重項の基底で表したときの成分に対応している． $\mathbf{q} \rightarrow 0$ に対して、 $(\langle \mathbf{k}_\beta | \otimes \langle -\mathbf{k}_\beta |) \Gamma(|\mathbf{k}_\alpha \rangle \otimes |-\mathbf{k}_\alpha \rangle)$ を計算することにより、 $\Gamma_{00} \propto \langle T | \Gamma | T \rangle$ と $\Gamma_{11} \propto \langle S | \Gamma | S \rangle$ となっていることが分かる．ただし $|T\rangle = |c\uparrow\rangle \otimes |c\uparrow\rangle$ はバンド内三重項であり、 $|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|c\uparrow\rangle \otimes |v\downarrow\rangle - |v\downarrow\rangle \otimes |c\uparrow\rangle)$ はバンド間の一重項である．ここでバンド内三重項とは $|c\rangle$ と $|c\rangle$ もしくは $|v\rangle$ と $|v\rangle$ の三重項を意味しており、バンド間一重項とは $|c\rangle$ と $|v\rangle$ の一重項を意味している． Γ_{22} はもう一つのバンド内三重項 ($|v\downarrow\rangle \otimes |v\downarrow\rangle$) と対応する．バンド内一重項 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|c\uparrow\rangle \otimes |c\downarrow\rangle - |c\downarrow\rangle \otimes |c\uparrow\rangle)$ とバンド内三重項の $\frac{1}{\sqrt{2}}(|c\uparrow\rangle \otimes |c\downarrow\rangle + |c\downarrow\rangle \otimes |c\uparrow\rangle)$ の成分をもつクーペロンは現れない．これは $k_z = 0$ の HLN 理論においてこれらの一重項と三重項が現れない理由と同じであると考えられる． $\Gamma(\mathbf{q})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ は $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{k}_F|$ が満たされるとき、 \mathbf{q} のみに依存する．(ただし $\mathbf{k}' = \mathbf{q} - \mathbf{k}$ とした．) このとき $\Gamma(\mathbf{q})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ の \mathbf{k} と \mathbf{k}' の添字を取り除き、 $\Gamma(\mathbf{q})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sim \Gamma(\mathbf{q})$ とすることができる．電気伝導度に対する量子補正 (3.2.5) は、

$$\begin{aligned} \delta\sigma_W(L) &= -\frac{e^2\hbar}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{q}) \gamma^2 \frac{E_F^2 - \Delta^2}{E_F^2} \langle \cos^2\phi \rangle_F \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G^R(\mathbf{k}) G^R(-\mathbf{k}) G^A(\mathbf{k}) G^A(-\mathbf{k}) \\ &= -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left(\alpha_t \log \frac{\ell_t^{-2} + \ell_0^{-2}}{\ell_t^{-2} + L^{-2}} + \alpha_s \log \frac{\ell_s^{-2} + \ell_0^{-2}}{\ell_s^{-2} + L^{-2}} \right) \end{aligned} \quad (3.2.27)$$

となる． L は系のサイズである．第一項目がバンド内三重項、第二項目がバンド間一重項である．二次元結晶に対して垂直方向に磁場を印可した場合の磁気伝導度は

$$\delta\sigma_W(B) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \sum_{i=t,s} \alpha_i \left[\Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_0^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_i^2} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_i^2} \right) \right] \quad (3.2.28)$$

となる． ℓ_ϕ は位相緩和長である．二電子対の磁氣的長さを $\ell_B = \sqrt{\hbar/4eB}$ とおいた．図 3.2.3 に磁気伝導度の磁場依存性をプロットした． $E_F/\Delta \sim 1$ のときは弱局在を示し、 E_F/Δ が十分大きいときは弱反局在がおきる． $B \rightarrow 0$ の極限ではディガンマ関数の漸近展開より、式 (3.2.28) は

$$\delta\sigma_W(0) \sim -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \sum_{i=t,s} \alpha_i \log \frac{\ell_0^{-2} + \ell_i^{-2}}{\ell_\phi^{-2} + \ell_i^{-2}} \quad (3.2.29)$$

となる． $\delta\sigma_W(0)$ は $\delta\sigma_W(L)$ において $L \rightarrow \ell_\phi$ と置き換えたものに等しい． E_F の変化による WL から WAL へのクロスオーバーは以下に示すようにバンド内三重項 (α_t) とバンド間

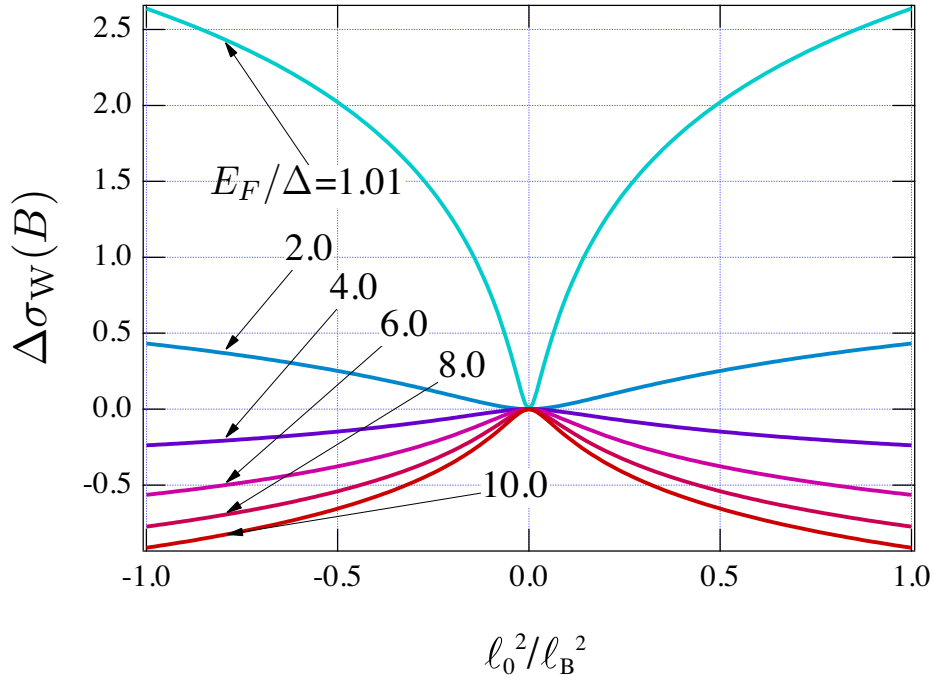


図 3.2.3 $\Delta\sigma_W(B)$ の磁場依存性. $\Delta\sigma(B) = [\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)]/(e^2/2\pi^2\hbar)$ とした. λ を変えて, それぞれプロットした. $\ell_0/\ell_\phi = 0.1$ とした.

一重項 (α_s) の関係によって理解することができる. 図 3.2.4 に α_t と $-\alpha_s$ の大きさの E_F 依存性をプロットした. $E_F \lesssim E_c$ のとき α_t は $-\alpha_s$ よりも大きくなる. すなわち電気伝導度の量子補正効果は正となり WL が生じる. しかし $E_F \gtrsim E_c$ のとき α_s は $-\alpha_t$ よりも大きくなり, 結果として WAL が生じる. この性質は HLN 理論によって説明される希薄 SOC 系における WAL とは明らかに異なる振る舞いである.

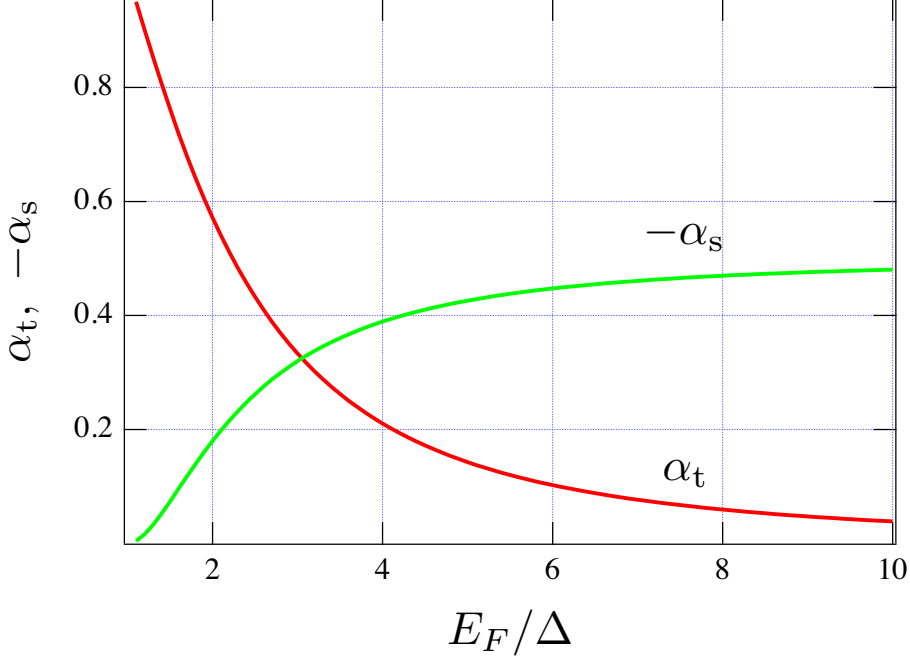


図 3.2.4 α_t と $-\alpha_s$ の $\lambda = E_F/\Delta$ 依存性.

3.3 WAL 領域における σ_W と σ_{HLN} の比較

$\tau_{\text{so},x}^{-1} = \tau_{\text{so},y}^{-1} \neq 0$ となるとき, HLN 理論における磁気伝導度 σ_{HLN} は次の式で与えられる.

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{\text{HLN}}(B) = & -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left[\alpha_{\text{H},1} \left\{ \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_0^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_{\text{so}}^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{4}{3} \frac{\ell_B^2}{\ell_{\text{so}}^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) \right\} \right. \\ & \left. + \alpha_{\text{H},2} \left\{ \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_{\text{so}}^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2}\right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

ここで ℓ_{so} は $\tau_{\text{so}}^{-1} \ll \tau_0^{-1}$ として,

$$\ell_{\text{so}}^{-2} = \frac{\frac{1}{\tau_{\text{so}}}}{D_0 \left(1 - \frac{4\tau}{3\tau_{\text{so}}}\right)} \sim \frac{1}{D_0 \tau_{\text{so}}} \quad (3.3.2)$$

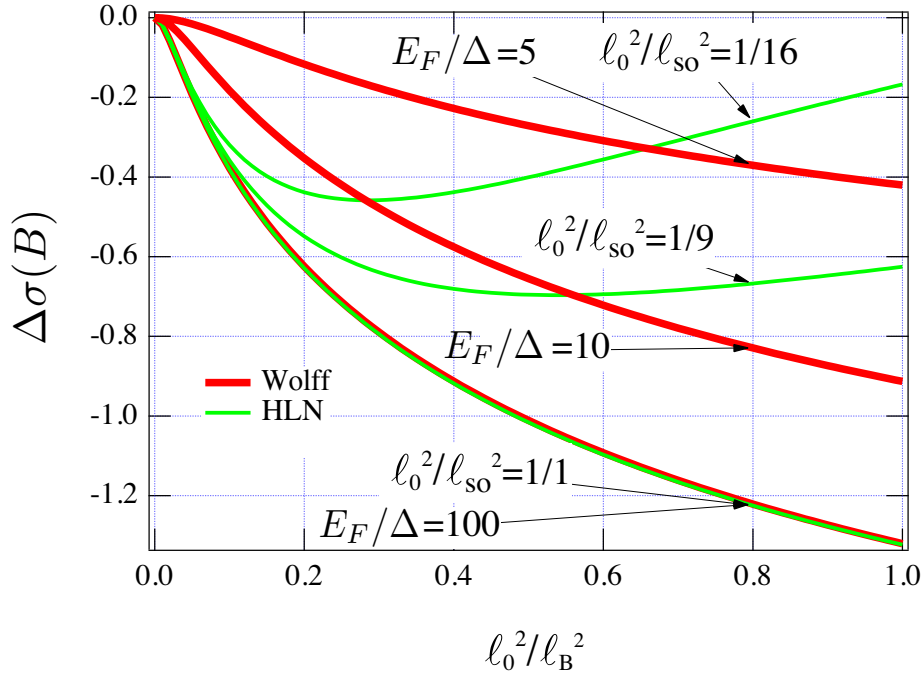


図 3.3.1 弱反局在領域における $\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)$ の磁場依存性. $\Delta\sigma(B) = [\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)]/(e^2/2\pi^2\hbar)$ とした. 太線が $\delta\sigma_W$, 細線が $\delta\sigma_{HLN}$ である $\delta\sigma_W$, $\delta\sigma_{HLN}$ において ℓ_0/ℓ_ϕ は共通のパラメーターである. $\ell_0^2/\ell_\phi^2 = 0.01$ とした.

とした. このときバンド内三重項の強さは $\alpha_{H,1} = 3/2$, およびバンド内一重項の強さは $\alpha_{H,2} = -1/2$ と与えられる. WAL 領域について図 3.3.1 に $\delta\sigma_W$ と $\delta\sigma_{HLN}$ の磁場依存性をプロットした. WAL 領域において HLN 公式と違い $\delta\sigma_W$ のふるまいは大きく異なる. これは Γ の成分の違いによって理解することができる. HLN 公式 (3.3.1) はスピン一重項から生じる項を一つとスピン三重項から生じる項を三つもつ [54]. HLN において弱反局在を与える Γ はスピン一重項であり, 低磁場において優勢となる. 一方高磁場においては三つある三重項が優勢となり磁気伝導度は増加する.

$\delta\sigma_W(B)$ はスピンの縮退を考慮するとバンド内スピン三重項, バンド間スピン一重項をそれぞれ二つもつ. $\delta\sigma_W(B)$ において低磁場領域はさらに二つに分けられる. $\ell_\phi \gg \ell_t \gg \ell_B \gg \ell_s$ においては

$$\delta\sigma_W(B) \sim -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left(\alpha_t \log \frac{\ell_B^2}{\ell_0^2} + \alpha_s \log \frac{\ell_0^{-2} + \ell_s^{-2}}{\ell_s^{-2}} \right) \quad (3.3.3)$$

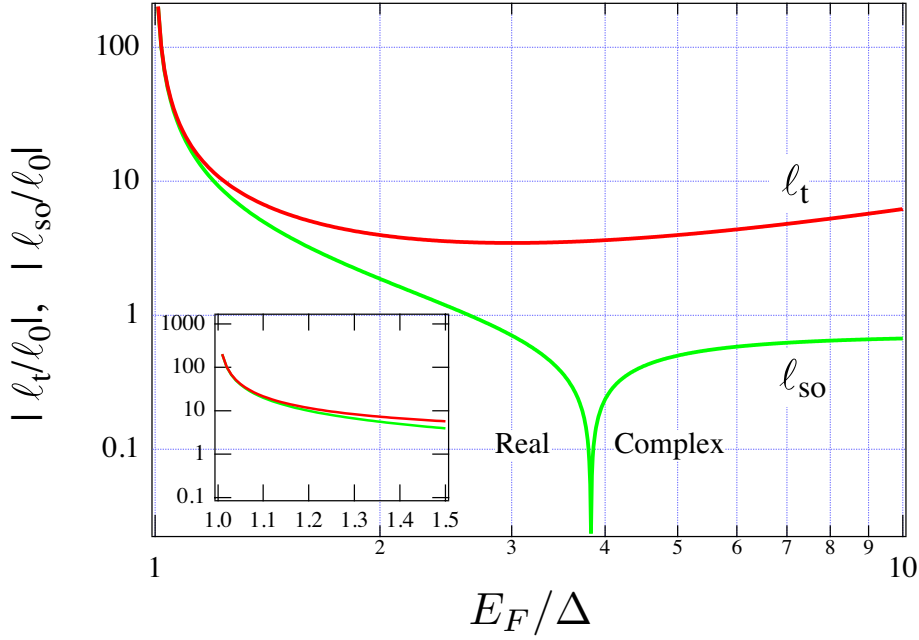


図 3.4.1 $\delta\sigma_W$ と $\delta\sigma_{W'}$ の規格化されたスピン緩和長 ℓ_t と ℓ_{so} の $\lambda = E_F/\Delta$ 依存性. ℓ_{so} は $E_F/\Delta = 1 + 2\sqrt{2}$ で実数から純虚数に転じる.

$\ell_\phi \gg \ell_s \gg \ell_B \gg \ell_t$ においては

$$\delta\sigma_W(B) \sim -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left(\alpha_t \log \frac{\ell_0^{-2} + \ell_t^{-2}}{\ell_t^{-2}} + \alpha_s \log \frac{\ell_B^2}{\ell_0^2} \right) \quad (3.3.4)$$

となる. 高磁場領域 $\ell_\phi \gg \ell_i \gg \ell_B$ においては,

$$\delta\sigma_W(B) \sim -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \sum_{i=t,s} \alpha_i \log \frac{\ell_B^2}{\ell_0^2} \quad (3.3.5)$$

強磁場で WL が優勢のとき $\alpha_t > \alpha_s$ かつ低磁場で WAL が優勢のとき $\ell_\phi \gg \ell_s \gg \ell_B \gg \ell_t$ に極値が生じる. この条件を満たす λ は $2.92 < \lambda < 3.05$ の範囲に限られる. この範囲において $\alpha_t + \alpha_s$ は HLN における $\alpha_{H,1} + \alpha_{H,2} = 1$ に比べて十分小さく, さらに有限の ℓ_t^{-2} , ℓ_s^{-2} によって対数発散が抑えられているため明確な極値が生じない.

3.4 WL 領域における σ_W と σ_{HLN} の比較

節 3.2 で SOC 格子系では WL と WAL の両方が生じうることを見た. 一般に SOC が強い系においては WAL のみが生じると期待されるため, これは驚くべきことである. この

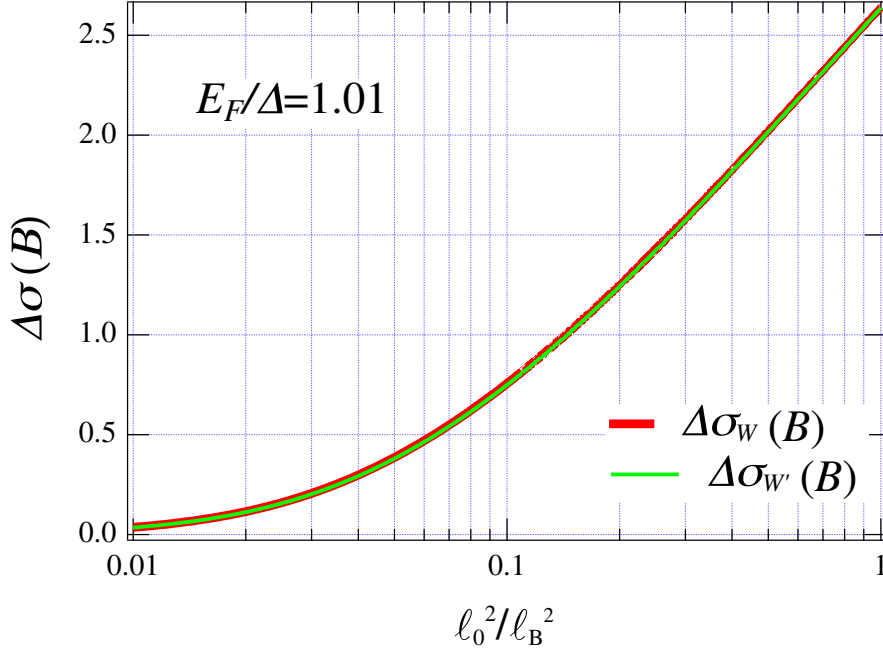


図 3.4.2 弱局在領域における $\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)$ の磁場依存性. $\Delta\sigma(B) = [\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)]/(e^2/2\pi^2\hbar)$ とした. 太線が $\delta\sigma_W$, 細線が $\delta\sigma_{W'}$ である $\delta\sigma_W, \delta\sigma_{W'}$ において ℓ_0/ℓ_ϕ は共通のパラメーターである. $\ell_0^2/\ell_\phi^2 = 0.01$ とした. $\delta\sigma_{W'}$ において $\ell_0^2/\ell_{so}^2 = 1/10000$ とした.

節では SOC 格子系において WL を引き起こす機構について見る. WL の機構を調べることによって非従来の WAL の機構も理解することができる. WL が起きる領域は E_F がバンド端に近いような状況, すなわち $E_F \sim \Delta$ のような領域である. このような領域では Foldy-Wouthuysen (FW) 変換を用いることで, 4×4 のハミルトニアンから近似的に 2×2 のブロック対角化された低エネルギー有効ハミルトニアンを得ることができる [39]. 式 (3.2.1) の $(\gamma^2/\Delta)^2$ のオーダーまでの FW 変換を考える. まず \mathcal{H}_W を以下のようにおく.

$$\mathcal{H}_W = \beta\Delta + \mathcal{E} + \mathcal{O} \quad (3.4.1)$$

ただし $\beta, \mathcal{E}, \mathcal{O}$ は

$$\beta = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad (3.4.2)$$

$$\mathcal{E} = V(x), \quad \mathcal{O} = \gamma\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{k} \begin{bmatrix} 0 & i\gamma\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ -i\gamma\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.4.3)$$

である。 α は

$$\alpha = \begin{bmatrix} 0 & i\sigma \\ -i\sigma & 0 \end{bmatrix} \quad (3.4.4)$$

である。 $\beta\mathcal{O} = -\mathcal{O}\beta$, $\mathcal{E}\mathcal{O} = \mathcal{O}\mathcal{E}$ が成り立つことに注意する。以下のように, \mathcal{H}_W を iS に
よってユニタリー変換したハミルトニアン, \mathcal{H}'_W を考える。

$$\mathcal{H}'_W = e^{iS} \mathcal{H}_W e^{-iS} \quad (3.4.5)$$

ただし $iS = \beta\mathcal{O}/(2\Delta)$ である。この右辺は Campbell-Baker-Hausdorff 公式より,

$$e^{iS} \mathcal{H}_W e^{-iS} = \mathcal{H}_W + [iS, \mathcal{H}_W] + \frac{1}{2!} [iS, [iS, \mathcal{H}_W]] \cdots \quad (3.4.6)$$

となる。上式において \mathcal{O} の4次までを考える。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_W = & \beta \left(\Delta + \frac{\mathcal{O}^2}{2\Delta} - \frac{\mathcal{O}^4}{8\Delta^3} \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8\Delta^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] \\ & + \frac{\beta}{2\Delta} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3\Delta^2} \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

\mathcal{O} の偶数次数の項, および \mathcal{E} を含む項をまとめて新たに以下のように定義する。

$$\mathcal{E}' = \beta \frac{\mathcal{O}^2}{2\Delta} - \beta \frac{\mathcal{O}^4}{8\Delta^3} + \mathcal{E} - \frac{1}{8\Delta^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] \quad (3.4.8)$$

また \mathcal{O} を奇数次数含む項を以下のように定義する。

$$\mathcal{O}' = \frac{\beta}{2\Delta} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3\Delta^2} \quad (3.4.9)$$

これらを用いると式 (3.4.7) は

$$\mathcal{H}'_W = \beta\Delta + \mathcal{E}' + \mathcal{O}' \quad (3.4.10)$$

となる。同様の議論を繰り返すことにより,

$$\mathcal{H}''_W = \beta\Delta + \mathcal{E}' + \frac{\beta}{2\Delta} [\mathcal{O}', \mathcal{E}'] \quad (3.4.11)$$

同様にして \mathcal{O}' に関して奇数次数の項を以下のようにおく。

$$\mathcal{O}'' = \frac{\beta}{2\Delta} [\mathcal{O}', \mathcal{E}'] \quad (3.4.12)$$

この項を消去することでブロック対角化された非相対論ハミルトニアンが得られる。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}''_W = & \beta\Delta + \frac{\gamma^2 k^2}{2\Delta} - \frac{\beta\gamma^4 k^4}{8\Delta^3} + V(x) \\ & + \frac{\gamma}{8\Delta^2} \nabla^2 V(x) + \frac{\gamma^2}{4\Delta^2} \sigma \cdot (\nabla V \times \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.4.13)$$

ディラック理論と比較すると、第 3 項は運動エネルギー補正、第 5 項がダーウィン項、第 6 項が SOC 項に対応する。 \mathcal{H}'_W は HLN 理論が考えているハミルトニアンと第 3 項、第 4 項を除いて本質的に等価である。それゆえ、 \mathcal{H}'_W に対して、HLN 理論と同様の方法で電気伝導度の量子補正 $\delta\sigma_{W'}$ を計算することができる。スピン緩和時間は最低次のボルン近似で計算すると以下ようになる。

$$\frac{\hbar}{2\tau_{so}} = \pi n_i u_0^2 \rho_0 \frac{(\lambda - 1)^2}{8} \quad (3.4.14)$$

ρ_0 は状態密度で $\rho_0 = V\Delta/\pi\hbar^2\gamma^2$ である。フェルミ面近傍が重要であることを用いて、 \mathbf{k}, \mathbf{k}' の大きさをフェルミ波数に置き換えた。また $E_F/\Delta = \lambda$ とおいた。今、二次元系のハミルトニアンを考えているため波数 \mathbf{k} は $k_z = 0$ である。したがって式 (2.4.19) より $\tau_{so,x}^{-1} = \tau_{so,y}^{-1} = 0$ となり、 $\hbar/2\tau_{so} = \hbar/2\tau_{so,z}$ となる。 $\tau_{so,x}^{-1} = \tau_{so,y}^{-1} = 0$ の場合、 $\delta\sigma_{W'}$ は三重項のみを持つ。 $\delta\sigma_{W'}$ は以下ようになる。

$$\delta\sigma_{W'} = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \alpha_1 \log \frac{\ell_{so}^{-2} + \ell_0^{-2}}{\ell_{so}^{-2} + L^{-2}} \quad (3.4.15)$$

スピン緩和長は

$$\ell_{so}^{-2} = \frac{2}{D_0 \left(1 - \frac{2\tau}{\tau_{so,z}}\right)} \quad (3.4.16)$$

である。ただし ℓ_{so} は実際のスピン緩和長の定義 $\ell_{so} = \sqrt{D_0\tau_{so}}$ とは異なる。以上の解析を通して、SOC 系格子系における非従来型の WAL について理解できる。従来の希薄 SOC 系では、不純物散乱の過程で電子の軌道運動が 3 次元的事であることによってスピンフリップが生じると仮定する。その結果バンド内一重項によって WAL が生じる。しかし SOC 格子系ではスピンフリップを伴うポテンシャルを考慮しない場合でも WAL が生じる。SOC 格子系では $\sigma \cdot \mathbf{k}$ の項により電子のスピンはブロッホバンドの伝導体と価電子体の成分の重ね合わせとなる。このバンド間 SOC 効果によってバンド間一重項クーペロン不安定性が誘起され、結果として、スピンを保存する散乱のみがある場合でも WAL が起きる。表 2 に Γ の成分の違いについてまとめた。

$\ell_t \leftrightarrow \ell_{so}$ という対応があると仮定すると明らかに $\delta\sigma_{W'}$ は $\delta\sigma_W$ の三重項の部分と対応していることが分かる。図 3.4.1 に ℓ_{so} と ℓ_t を λ の関数としてプロットした。 E_F がバンド端に十分近いときは ℓ_{so} と ℓ_t が一致することが分かる。 ℓ_t^{-2}/ℓ_0^{-2} を $\lambda = 1$ まわりで展開すると

$$\frac{\ell_t^{-2}}{\ell_0^{-2}} = \frac{1}{4}(\lambda - 1)^2 + \mathcal{O}((\lambda - 1)^3) \quad (3.4.17)$$

表2 HLN (希薄 SOC 系), Wolff (SOC 格子系) の Γ の成分.

	三重項	一重項
HLN (希薄 SOC 系, $k_z \neq 0$)	$ c \uparrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle, c \downarrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle,$ $ c \uparrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle + c \downarrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle$	$ c \uparrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle - c \downarrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle$
HLN (希薄 SOC 系, $k_z = 0$)	$ c \uparrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle, c \downarrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle,$	なし
Wolff (SOC 格子系, $k_z = 0$)	$ c \uparrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle, c \downarrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle$	$ c \uparrow\rangle \otimes v \downarrow\rangle - v \downarrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle,$ $ c \downarrow\rangle \otimes v \uparrow\rangle - v \uparrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle$

となる. $\ell_{\text{so}}^{-2}/\ell_0^{-2}$ を $\lambda = 1$ まわりで展開すると

$$\frac{\ell_{\text{so}}^{-2}}{\ell_0^{-2}} = \frac{1}{4}(\lambda - 1)^2 + \mathcal{O}((\lambda - 1)^4) \quad (3.4.18)$$

となる. したがって $\mathcal{O}((\lambda - 1)^2)$ の範囲で $(\ell_{\text{so}}/\ell_0)^{-2}$ と $(\ell_t/\ell_0)^{-2}$ が一致する. ℓ_{so}/ℓ_0 は $E_F/\Delta = 1 + 2\sqrt{2}$ で虚数になり物理的に不適切な状況が現れる. これは $\sigma_{W'}$ では τ_{so} を摂動として扱っているためである. 一方 ℓ_t/ℓ_0 は λ の全領域で正の実数を取り, 非物理的な領域は現れない. $\lambda \rightarrow 1$ の極限では, $\delta\sigma_W$ においては $\alpha_t = 1$, $\alpha_s = 0$ となり, かつ $(\ell_t/\ell_0)^{-2} = (\ell_{\text{so}}/\ell_0)^{-2} = 0$ である. 図 3.4.2 に $\delta\sigma_W$ と $\delta\sigma_{W'}$ の磁場依存性をプロットした. $\lambda \rightarrow 1$ の極限で, $\delta\sigma_W$ と $\delta\sigma_{W'}$ は一致することが分かる.

3.5 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ と PbTe における WL-WAL クロスオーバー

最後に実験に対する理論的な提案を議論する. Bi 結晶は格子を組む原子が強い SOC をもっており, 典型的な SOC 格子系としてみなせる. Bi の BZ の L 点における低エネルギー有効ハミルトニアンは Wolff ハミルトニアンで記述できることが知られている. Bi 単結晶においては $\Delta = 7.7\text{meV}$, 化学ポテンシャル μ は $\mu = 35.3\text{meV}$, よって $\mu/\Delta = 4.6$ である [46, 96, 113]. したがって, Bi 単結晶では WAL が起きると予想される. これは実験的に観測されている結果と一致する [3, 65]. Bi 薄膜における WAL は, これまで HLN 理論による希薄 SOC 系の枠組みで理解されてきた. しかし, これまでのところ $\delta\sigma_{\text{HLN}}$ の特徴的な性質である極値は観測されていない. それゆえに $\delta\sigma(B)$ の単調減少するふるまいは SOC 格子系の枠組みで理解することができる. Bi は Sb をドーピングすることで μ/Δ を小さくする

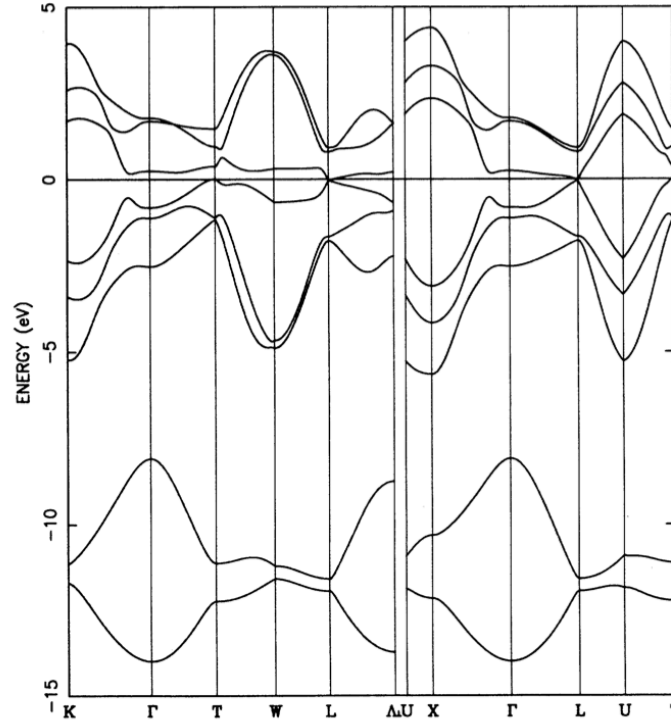


図 3.5.1 Bi の電子状態 (文献 [74] より引用).

ことができる [47, 105]. μ および Δ の Sb ドープ量 x の依存性は $\mu(x) = 4.6 - 4.6x/0.09$, $\pm\Delta(x) = 1 - x/0.04$ と近似できる [46]. 図 3.5.2(a) は $\mu(x)$ と $\Delta(x)$ の Sb ドープ量 x 依存性である. 図 3.5.2(b) に WL から WAL へと切り替わるときの磁気伝導度をプロットした. $\mu/\Delta \sim 3$ で WL と WAL が切り替わる. $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ において $x \sim 0.06$ で WL に転じると期待できる. このときのキャリア濃度は $3.3 \times 10^{14} \text{m}^{-2}$ である. ただし, 等方的な有効質量が $\gamma^2/\Delta = 2.6 \times 10^{-3} m_e$ であることを用いた [47, 114]. m_e は自由電子の質量である. 3次元系 SOC 格子系においてはトポロジカルに非自明な場合にのみ WL-WAL クロスオーバーが起きるとい最近の報告がある [40]. 我々の二次元 SOC 格子系の WL-WAL クロスオーバーはトポロジーによらない. 不純物のドープによる局在効果を排除し μ/Δ のみを変化させるためには圧力効果がより適している. もう一つの SOC 格子系の有力候補として PbTe がある [4, 23, 52, 60]. PbTe では加圧によって, バンドギャップを小さくできることが理論, 実験の双方により示されている [67, 101, 109]. 図 3.5 に PbTe の体積変化に対する L 点近傍のエネルギー変化の理論計算の図を示す [101]. 計算には自己無撞着 GW 近似が用いられている. バンドギャップが完全に閉じるのは 3.4 GPa と見積もられている. PbTe の圧力誘

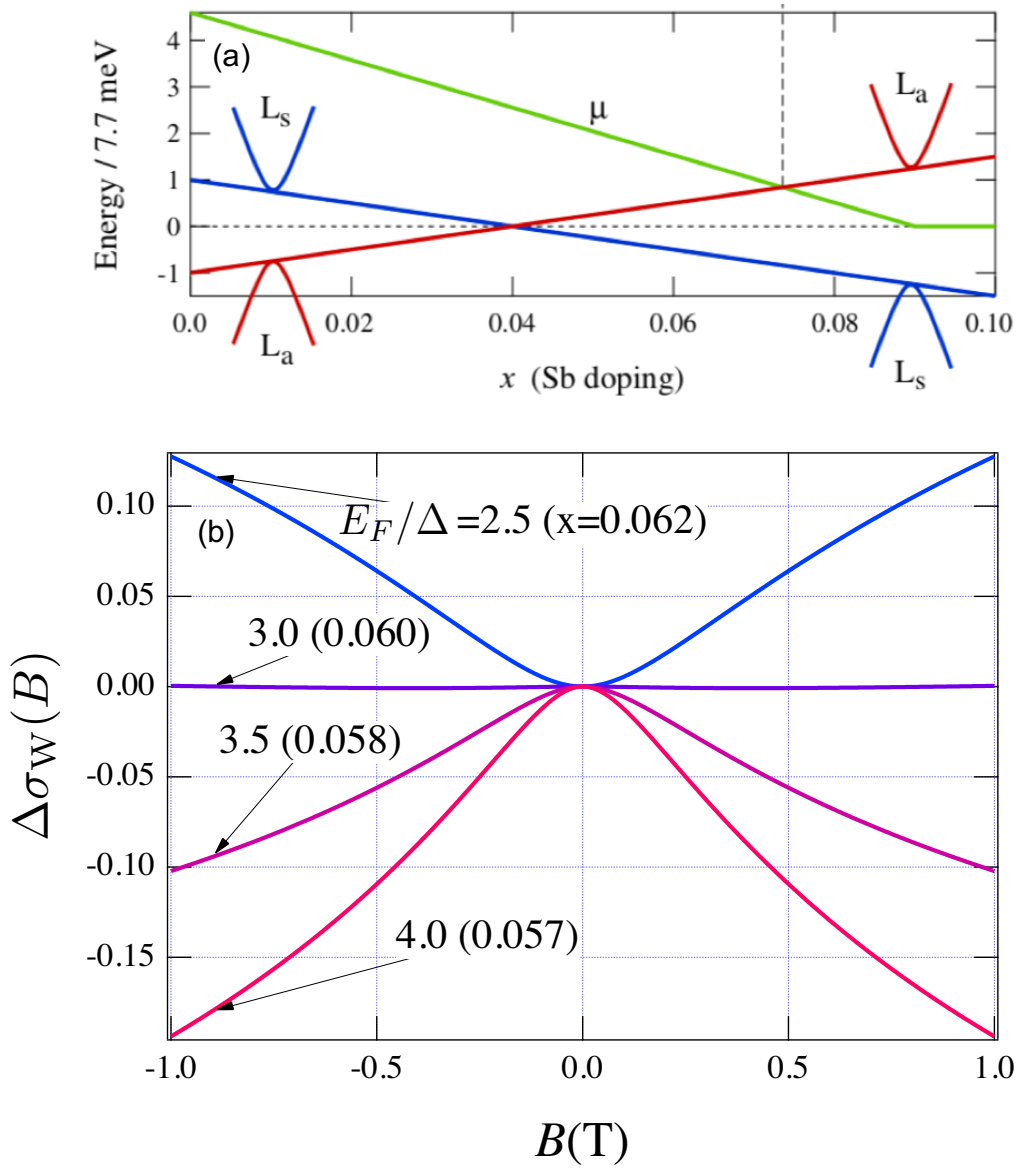


図 3.5.2 (a) $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ における化学ポテンシャル $\mu(x)$ と $\Delta(x)$ の Sb ドープ量 x 依存性. (文献 [46] より引用. 図のラベルを (b)→(a) と置き換えている.) (b) $\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)$ の磁場依存性. $\Delta\sigma(B) = [\delta\sigma(B) - \delta\sigma(0)] / (e^2/2\pi^2\hbar)$ とした. λ および $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ における Sb ドープ量 x を変えて, それぞれプロットした. $\ell_0 = 10\text{nm}$, $\ell_\phi = 200\text{nm}$ とした.

起構造相転移は 6.0GPa で起きる [18]. したがって構造相転移を起こす前の圧力でこのバンド反転が起きると期待できる. この性質と今回の我々の理論の結果から, PbTe において加

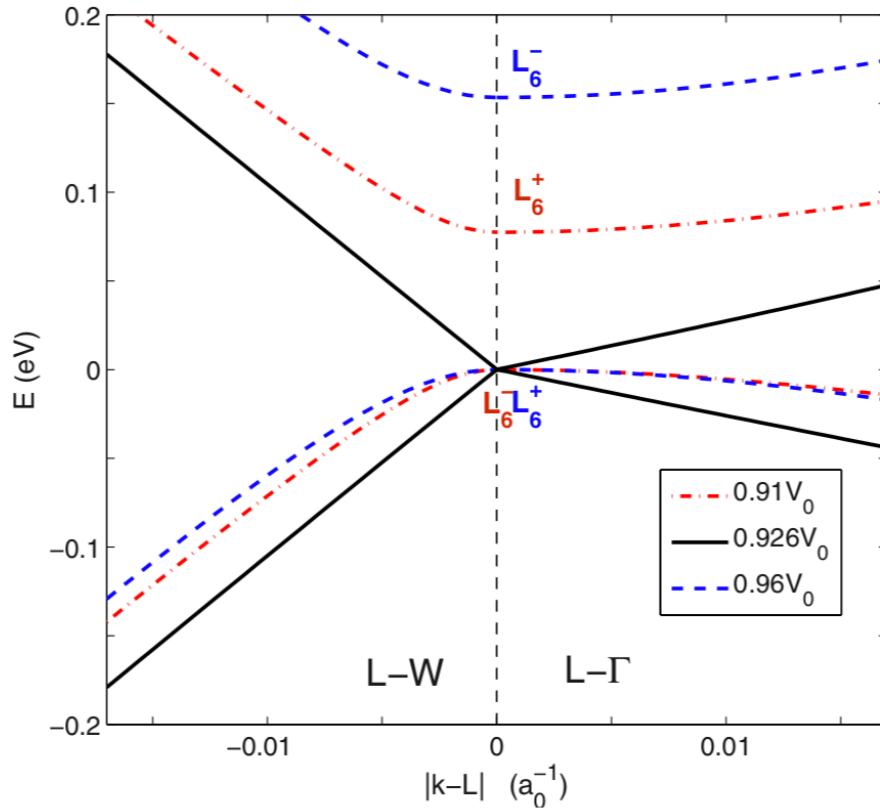


図 3.5.3 PbTe における圧力による L 点近傍のエネルギー変化 (文献 [101] より引用). BZ の L - W 方向, L - Γ 方向についてプロットしてある. 青点線は大気圧下での体積 V_0 に対して体積を $V = 0.96V_0$ としたときのバンド分散. 青字の L_6^+ , L_6^- はそのときのそれぞれ価電子帯の頂点, 伝導帯の底の既約表現である. 実線は $V = 0.926V_0$ のときで, このときバンドギャップがゼロになる. このときの圧力は 3.4GPa である. 赤点線は $V = 0.91V_0$ のときでバンド反転後を表す. 赤字の L_6^+ , L_6^- はそのときのそれぞれ価電子帯の頂点, 伝導帯の底の既約表現であり, 青点線の場合と順序が反転している.

圧による WL-WAL クロスオーバーの制御が実現できる.

第4章 スピン軌道結合格子におけるスピン緩和長の評価

4.1 研究背景

結晶の SOC が強い物質，いわゆる“SOC 格子系”において，量子補正効果のふるまいは従来の量子補正効果の理論である HLN 理論とは大きく異なる [53].

量子補正効果にはスピンやバンドの自由度をもった二つの電子が関与するため，解くべき Bethe-Salpeter 方程式は行列で表される．この行列の次元は一つの電子がもつ状態の自由度の積となる．希薄 SOC 系の理論である HLN 理論の場合は $|\uparrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\downarrow, \downarrow\rangle$ の 4 自由度となる．それに伴い，クーパー不安定性をもつ 4 種類のクーペロンがそれぞれ量子補正効果に寄与する．SOC 格子系の場合はこれまで見てきたように，一つの電子状態の自由度は $|c \uparrow\rangle, |c \downarrow\rangle, |v \uparrow\rangle, |v \downarrow\rangle$ の 4 つであるため，素朴に考えればクーペロンの成分の数は少なくとも 16 個現れることが予想される．しかし第 3 章までの SOC 格子系における量子補正効果の計算によると，バンド内の三重項，およびバンド間一重項がそれぞれ 2 つ現れるのみであった．ただしこれまでの解析では，不純物による散乱過程において，固有状態を変えない過程のみが考慮されていた．

本章ではすべての状態遷移を考慮することでクーパー不安定性を与えるクーペロンの成分を詳細に調べた．結果としてこれまでの結果と同様にバンド内三重項，バンド間一重項がクーパー不安定性を与えることを示した．またすべての状態遷移を考慮することによって，スピン緩和長の定量的な評価が可能な，電気伝導度の解析的表式を得た．この表式を用いて，HLN 理論との比較を行い HLN 理論から得られるスピン緩和長との差異を調べた．スピン緩和長は HLN 理論で得られるものよりも 2 倍程度長くなることを明らかにした．本章ではエネルギー固有状態の添字をギリシャ文字とし，Wolff ハミルトニアン基底の添字を m, n, m', n' としている．同じ添字が式中に現れた場合は両者ともに和を取ると約束する．

4.2 不純物散乱と緩和時間

系のハミルトニアンは第3章と同様に式 (3.2.1) を用いる．エネルギー固有状態はヘリシティ演算子 (1.3.39) との同時固有状態 (1.3.41)-(1.3.44) を用いる．不純物散乱の行列要素は以下ようになる．まずバンド内散乱について、

$$\langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 1, \mathbf{k}' \rangle = \frac{u_0 N^2}{2} \sum_i \left[(1 + Y^2) + (1 + Y^2) e^{i(\phi_{\mathbf{k}'} - \phi_{\mathbf{k}})} \right] e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_i} \quad (4.2.1)$$

バンド内スピン散乱について

$$\langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 2, \mathbf{k}' \rangle = \frac{u_0 N^2}{2} \sum_i \left[(1 - Y^2) + (1 - Y^2) e^{i(\phi_{\mathbf{k}'} - \phi_{\mathbf{k}})} \right] e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_i} \quad (4.2.2)$$

バンド間散乱について、

$$\langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 4, \mathbf{k}' \rangle = \frac{u_0 N^2}{2} \sum_i N^2 (2iY e^{i\phi_{\mathbf{k}}} - 2iY e^{-i\phi'_{\mathbf{k}}}) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_i} \quad (4.2.3)$$

緩和時間について計算を行う．最低次のボルン散乱を考えると全緩和時間は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{\text{sf}}} + \frac{1}{\tau_1} \\ &= 2\pi \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \langle | \langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \alpha, \mathbf{k}' \rangle |^2 \rangle_{\text{imp}} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\text{F}}) \\ &= 2\pi n u_0^2 \rho_0 N^4 (1 - Y^2)^2 \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

となる． n は不純物濃度， ρ_0 は1スピン自由度あたりの状態密度である． $1/\tau_0$ ， $1/\tau_{\text{Intra, sf}}$ ， $1/\tau_{\text{Inter, sf}}$ はそれぞれ運動量緩和時間，バンド内スピン緩和時間，バンド間スピン緩和時間の強さで、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_0} &= 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle | \langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 1, \mathbf{k}' \rangle |^2 \rangle_{\text{imp}} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\text{F}}) \\ &= 2\pi n u_0^2 \rho_0 N^4 \left[\frac{1}{2} (1 + Y^2)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{Intra, sf}}} &= 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle | \langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 2, \mathbf{k}' \rangle |^2 \rangle_{\text{imp}} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\text{F}}) \\ &= 2\pi n u_0^2 \rho_0 N^4 \left[\frac{1}{2} (1 - Y^2)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{Inter, sf}}} &= 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle | \langle 1, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | 4, \mathbf{k}' \rangle |^2 \rangle_{\text{imp}} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\text{F}}) \\ &= 2\pi n u_0^2 N^4 \rho_0 2Y^2 \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

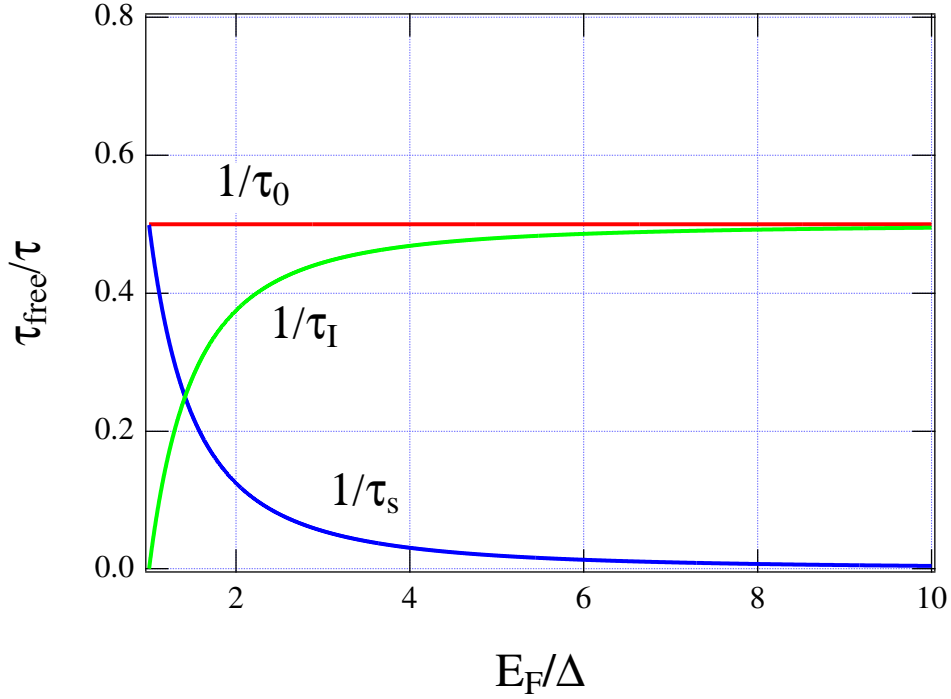


図 4.2.1 $1/\tau$ の $\lambda = E_F/\Delta$ 依存性. $1/\tau_{\text{free}} = 2\pi\rho_0 n u_0^2$ とおいた. $1/\tau_0$ が運動量緩和時間, $1/\tau_{\text{Intra,sf}}$ がバンド内スピン緩和時間, $1/\tau_{\text{Inter,sf}}$ がバンド間スピン緩和時間, を表す.

である. 図. 4.2.1 に $1/\tau$ の $\lambda = E_F/\Delta$ 依存性をプロットした. λ が増大するとバンド内スピン遷移は抑制され, バンド間スピン遷移が増大する. バンド内とバンド間スピン遷移確率の和は運動量散乱の確率と等しい. これは相対論的粒子においては運動量が変わると同時にスピンも変わるということを意味する.

4.3 バートックス補正

速度演算子の行列要素と速度演算子に対するバートックス補正を計算する. 速度演算子はハミルトニアン \mathcal{H}_0 の波数微分より,

$$\hat{v}^x = \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial k_x} = \begin{bmatrix} 0 & i\gamma\sigma_x \\ -i\gamma\sigma_x & 0 \end{bmatrix} \quad (4.3.1)$$

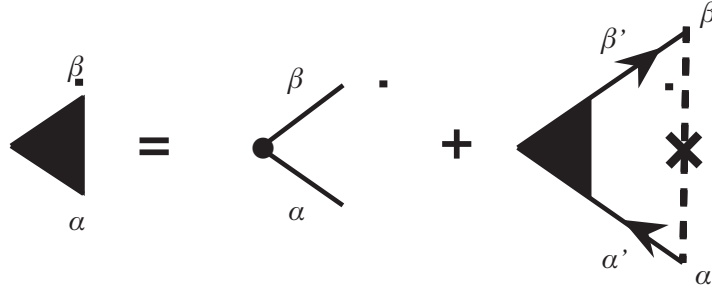


図 4.3.1 バーテックス補正を表すダイアグラム．式 (4.3.4) に対応する． α, β はエネルギー固有状態の番号に対応する．

である．速度行列要素はエネルギー固有状態を用いて，

$$\langle 1, \mathbf{k} | \hat{v}^x | 1, \mathbf{k} \rangle = \langle 2, \mathbf{k} | \hat{v}^x | 2, \mathbf{k} \rangle = 2N^2 \gamma Y \cos \phi_{\mathbf{k}} \quad (4.3.2)$$

$$\langle 1, \mathbf{k} | \hat{v}^x | 2, \mathbf{k} \rangle = 0 \quad (4.3.3)$$

である．バーテックス補正を考慮した速度演算子 \tilde{v}^x に対して成り立つ方程式は，

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{\beta\alpha}^x &= v_{\beta\alpha}^x + \sum_{\mathbf{k}'} G_{\alpha'}^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle \beta, \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle \alpha', \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \alpha, \mathbf{k} \rangle_{\text{imp}} \tilde{v}_{\beta'\alpha'}^x \\ &= v_{\beta\alpha}^x + nu_0^2 \sum_{\mathbf{k}'} G_{\alpha'}^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle \beta, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle \alpha', \mathbf{k}' | \alpha, \mathbf{k} \rangle \tilde{v}_{\beta'\alpha'}^x \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

である． G_{α} はグリーン関数で以下のように与えられる．

$$G_{\alpha}^{R/A} = \frac{1}{E_F - E_{\alpha} \pm i/2\tau} \quad (4.3.5)$$

$E_1 = E_2 = E_{\mathbf{k}}$, $E_3 = E_4 = -E_{\mathbf{k}}$ である．ただし同じ添字については和を取る．フェルミ面上における運動量が重要なので $\tilde{v}_{\beta\alpha}^x$ は \mathbf{k}' の角度のみに依存し， $|\mathbf{k}'|$ によらない場合を考える． $\langle \beta, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle$ の部分にも同様の仮定をおく．そうすると $|\mathbf{k}'|$ 積分は $G_{\alpha'}^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}')$ のみに作用する．また波数積分は以下のように書くことができる．

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left\langle \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \right\rangle_F \quad (4.3.6)$$

まず (α', β') の組み合わせごとのグリーン関数の $E_{\mathbf{k}'}$ 積分について計算を行う．

$(\alpha', \beta') = (1, 1)$ のとき

$$\rho_0 \int dE_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_F - E_{\mathbf{k}'} - \frac{i}{2\tau}} \frac{1}{E_F - E_{\mathbf{k}'} + \frac{i}{2\tau}} = 2\pi \rho_0 \tau \quad (4.3.7)$$

$(\alpha', \beta') = (1, 2)$ のときも $(\alpha', \beta') = (1, 1)$ の場合と等しい.

$(\alpha', \beta') = (1, 3)$ のとき

$$\rho_0 \int dE_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_F - E_{\mathbf{k}'} - \frac{i}{2\tau}} \frac{1}{E_F + E_{\mathbf{k}'} + \frac{i}{2\tau}} = 0 \quad (4.3.8)$$

$(\alpha', \beta') = (1, 4)$ のときも $(\alpha', \beta') = (1, 3)$ の場合と等しい.

また $(\alpha', \beta') = (2, 2)$, $(\alpha', \beta') = (3, 3)$, $(\alpha', \beta') = (4, 4)$ のときは $(\alpha', \beta') = (1, 1)$ の場合と等しい. 式 (4.3.4) において $(\alpha, \beta) = (1, 1)$ の場合を考え α' に関する和をあらわに書くと,

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{11}^x = v_{11}^x + nu_0^2 \sum_{\mathbf{k}'} & \left[G_1^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 1, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \tilde{v}_{\beta'1}^x \right. \\ & + G_2^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 2, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \tilde{v}_{\beta'2}^x \\ & + G_3^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 3, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \tilde{v}_{\beta'3}^x \\ & \left. + G_4^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 4, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \tilde{v}_{\beta'4}^x \right] \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

ここで $\tilde{v}_{\beta\alpha}^x$ が $\tilde{v}_{\beta\alpha}^x = \eta_v v_{\beta\beta}^x \delta_{\beta\alpha}$ と表されると仮定する. これを用いると,

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{11}^x = v_{11}^x + nu_0^2 \sum_{\mathbf{k}'} & \left[G_1^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 1, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{\beta'\beta'}^x \delta_{\beta'1} \right. \\ & + G_2^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 2, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{\beta'\beta'}^x \delta_{\beta'2} \\ & \left. + G_4^A(\mathbf{k}') G_{\beta'}^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | \beta', \mathbf{k}' \rangle \langle 4, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{\beta'\beta'}^x \delta_{\beta'4} \right] \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

となる. ここで $\langle 3, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle = 0$ であることを用いた. β' で和を取ると,

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{11}^x = v_{11}^x + nu_0^2 \sum_{\mathbf{k}'} & \left[G_1^A(\mathbf{k}') G_1^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | 1, \mathbf{k}' \rangle \langle 1, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{11}^x \right. \\ & + G_2^A(\mathbf{k}') G_2^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | 2, \mathbf{k}' \rangle \langle 2, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{22}^x \\ & \left. + G_4^A(\mathbf{k}') G_4^R(\mathbf{k}') \langle 1, \mathbf{k} | 4, \mathbf{k}' \rangle \langle 4, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{44}^x \right] \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

となる. グリーン関数部分は式 (4.3.7) の結果を用いると, 上式は,

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{11}^x = v_{11}^x + nu_0^2 2\pi \rho_0 \tau \frac{1}{2\pi} \int d\phi & \left[\langle 1, \mathbf{k} | 1, \mathbf{k}' \rangle \langle 1, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{11}^x \right. \\ & + \langle 1, \mathbf{k} | 2, \mathbf{k}' \rangle \langle 2, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{22}^x \\ & \left. + \langle 1, \mathbf{k} | 4, \mathbf{k}' \rangle \langle 4, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \eta_v v_{44}^x \right] \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

となる． $v_{11}^x = v_{22}^x = -v_{44}^x = 2\gamma N^2 Y \cos(\phi)$ より，

$$\begin{aligned} \eta_\nu v_{11}^x = v_{11}^x + nu_0^2 2\pi\rho_0\tau \frac{1}{2\pi} \eta_\nu \int d\phi v_{11}^x \Big[& \langle 1, \mathbf{k} | 1, \mathbf{k}' \rangle \langle 1, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \\ & + \langle 1, \mathbf{k} | 2, \mathbf{k}' \rangle \langle 2, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \\ & + \langle 1, \mathbf{k} | 4, \mathbf{k}' \rangle \langle 4, \mathbf{k}' | 1, \mathbf{k} \rangle \Big] \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

角度積分を実行すると，

$$\eta_\nu v_{11}^x = v_{11}^x + nu_0^2 2\pi\rho_0\tau \frac{1}{2\pi} \eta_\nu \frac{N^4}{4} v_{11}^x [2(1+Y^2)^2 - 2(1-Y^2)^2 + 8Y^2] \pi \quad (4.3.14)$$

となる．ここで式 (4.2.4) から

$$nu_0^2 = \frac{1}{2\tau\pi\rho_0 N^4 (1+Y^2)^2} \quad (4.3.15)$$

であるのでこれをを用いると，

$$\eta_\nu = 1 + \eta_\nu \frac{2Y^2}{(1+Y^2)^2} \quad (4.3.16)$$

となる．これを η_ν について解き λ で表すと，

$$\eta_\nu = \frac{2\lambda^2}{\lambda^2 + 1} \quad (4.3.17)$$

となる．

明らかに $\lambda \rightarrow \infty$ で $\eta_\nu \rightarrow 2$ となりグラフェン等のゼロ質量ディラック電子の結果を再現する [10, 81, 100].

4.4 Bethe-Salpeter 方程式

Γ は以下の Bethe-Salpeter 方程式を満たす．

$$\Gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) = \gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}_3} \gamma_{\xi\nu}^{\alpha\mu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3, \mathbf{q}) G_\nu^R(\mathbf{k}_3) G_\mu^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}_3) \Gamma_{\nu\omega}^{\mu\beta}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \quad (4.4.1)$$

γ は以下を満たす．

$$\begin{aligned} \gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) &= \langle \langle \beta, \mathbf{k}_2 | V(\mathbf{r}) | \alpha, \mathbf{k}_1 \rangle \langle \omega, \mathbf{q} - \mathbf{k}_2 | V(\mathbf{r}) | \xi, \mathbf{q} - \mathbf{k}_1 \rangle \rangle_{\text{imp}} \\ &= nu_0^2 \langle \beta, \mathbf{k}_2 | n \rangle \langle \omega, \mathbf{q} - \mathbf{k}_2 | n' \rangle \langle m | \alpha, \mathbf{k}_1 \rangle \langle m' | \xi, \mathbf{q} - \mathbf{k}_1 \rangle \delta_{mn} \delta_{m'n'} \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

ただしここで完備関係式 $\hat{1} = \sum_4 |n\rangle \langle n|$ を用いた． $\langle n|$, $|n\rangle$ はそれぞれ単位行，列ベクトルで $\langle 1| = (1, 0, 0, 0)$, $\langle 2| = (0, 1, 0, 0)$, $\langle 3| = (0, 0, 1, 0)$, $\langle 4| = (0, 0, 0, 1)$, $|1\rangle = {}^t(1, 0, 0, 0)$

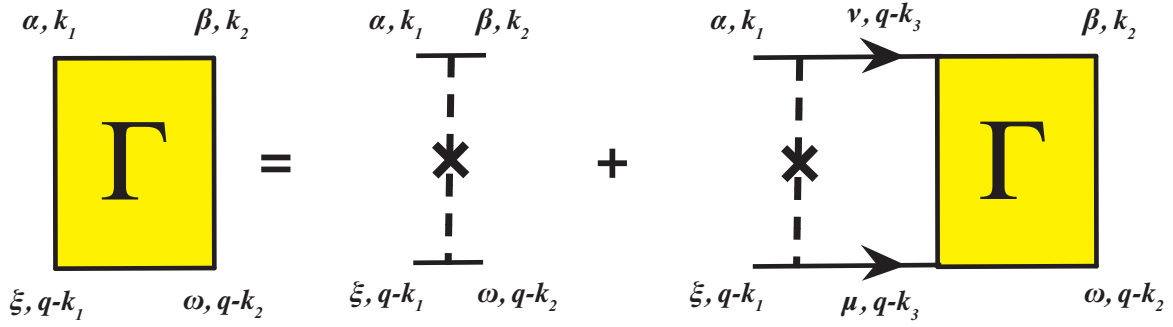


図 4.4.1 Bethe-Salpeter 方程式を表すダイアグラム．式 (4.4.1) に対応する．

, $|2\rangle = {}^t(0, 1, 0, 0)$, $|3\rangle = {}^t(0, 0, 1, 0)$, $|4\rangle = {}^t(0, 0, 0, 1)$ である． $\Gamma(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{q})$ の波数依存性は $\mathbf{q} = 0$ で特異性をもつことを考慮すると以下の形で書ける．

$$\Gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) = \langle \beta, \mathbf{k}_2 | n \rangle \langle \omega, \mathbf{q} - \mathbf{k}_2 | n' \rangle \langle m | \alpha, \mathbf{k}_1 \rangle \langle m' | \xi, \mathbf{q} - \mathbf{k}_1 \rangle \Gamma_{m'n'}^{mn}(\mathbf{q}) \quad (4.4.3)$$

この関係を用いると

$$\Gamma_{m'n'}^{mn}(\mathbf{q}) = nu_0^2 \delta_{mn} \delta_{m'n'} + nu_0^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{lm}^R(\mathbf{k}) G_{l'm'}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \Gamma_{l'n'}^{ln}(\mathbf{q}) \quad (4.4.4)$$

が成り立つ．ここでグリーン関数は以下のようになる．

$$G_{lm}^{R/A}(\mathbf{k}) = \langle \alpha, \mathbf{k} | m \rangle G_{\alpha}^{R/A}(\mathbf{k}) \langle l | \alpha, \mathbf{k} \rangle \quad (4.4.5)$$

式 (4.4.4) を行列の積の形で書くと,

$$(\hat{\mathbf{I}} - nu_0^2 \hat{\Pi}) \hat{\Gamma} = nu_0^2 \hat{\mathbf{I}} \quad (4.4.6)$$

となる．ただし \hat{I} は 16×16 の単位行列である．ここで

$$\Pi_{l'm'}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} G_{lm}^R(\mathbf{k}) G_{l'm'}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.7)$$

とおいた．式 (4.4.5) において α について和を取り， G_{lm}^R の成分をあらわに書くと以下のようになる．

$$G_{11}^R(\mathbf{k}) = N^2 G_1^R(\mathbf{k}) + N^2 Y^2 G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.8)$$

$$G_{14}^R(\mathbf{k}) = iN^2 Y e^{-i\phi} G_1^R(\mathbf{k}) - iN^2 Y e^{-i\phi} G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.9)$$

$$G_{41}^R(\mathbf{k}) = -iN^2 Y e^{i\phi} G_1^R(\mathbf{k}) + iN^2 Y e^{i\phi} G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.10)$$

$$G_{44}^R(\mathbf{k}) = N^2 Y^2 G_1^R(\mathbf{k}) + N^2 G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.11)$$

$$G_{22}^R(\mathbf{k}) = N^2 G_1^R(\mathbf{k}) + N^2 Y^2 G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.12)$$

$$G_{23}^R(\mathbf{k}) = iN^2 Y e^{i\phi} G_1^R(\mathbf{k}) - iN^2 Y e^{i\phi} G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.13)$$

$$G_{32}^R(\mathbf{k}) = -iN^2 Y e^{-i\phi} G_1^R(\mathbf{k}) + iN^2 Y e^{-i\phi} G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.14)$$

$$G_{33}^R(\mathbf{k}) = N^2 Y^2 G_1^R(\mathbf{k}) + N^2 G_4^R(\mathbf{k}) \quad (4.4.15)$$

$$G_{12}^R(\mathbf{k}) = G_{13}^R(\mathbf{k}) = G_{21}^R(\mathbf{k}) = G_{24}^R(\mathbf{k}) = 0 \quad (4.4.16)$$

$$G_{31}^R(\mathbf{k}) = G_{34}^R(\mathbf{k}) = G_{42}^R(\mathbf{k}) = G_{43}^R(\mathbf{k}) = 0 \quad (4.4.17)$$

ただし $G_1^{R/A}(\mathbf{k}) = G_2^{R/A}(\mathbf{k})$ ， $G_3^{R/A}(\mathbf{k}) = G_4^{R/A}(\mathbf{k})$ であることを用いた． $G_{lm}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k})$ については以下のようになる．

$$G_{11}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = N^2 G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + N^2 Y^2 G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.18)$$

$$G_{14}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = -iN^2 Y e^{-i\phi} G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + iN^2 Y e^{-i\phi} G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.19)$$

$$G_{41}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = iN^2 Y e^{i\phi} G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) - iN^2 Y e^{i\phi} G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.20)$$

$$G_{44}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = N^2 Y^2 G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + N^2 G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.21)$$

$$G_{22}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = N^2 G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + N^2 Y^2 G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.22)$$

$$G_{23}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = -iN^2 Y e^{i\phi} G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + iN^2 Y e^{i\phi} G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.23)$$

$$G_{32}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = iN^2 Y e^{-i\phi} G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) - iN^2 Y e^{-i\phi} G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.24)$$

$$G_{33}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = N^2 Y^2 G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + N^2 G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (4.4.25)$$

$$G_{12}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = G_{13}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = G_{21}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = G_{24}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = 0 \quad (4.4.26)$$

$$G_{31}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = G_{34}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = G_{42}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = G_{43}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = 0 \quad (4.4.27)$$

4.4.1 $\hat{\Pi}$ の計算

$G_{lm}^R(\mathbf{k})$, $G_{l'm'}^A(\mathbf{q} - \mathbf{k})$ を用いて, $\Pi_{l'm'}^{lm}$ を計算すると以下ようになる.
 $(l, m) = (1, 1)$, $(l, m) = (2, 2)$ のとき.

$$\begin{aligned} \Pi_{11}^{lm} = \Pi_{22}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^4 \right] \end{aligned} \quad (4.4.28)$$

$$\Pi_{12}^{lm} = \Pi_{21}^{lm} = \Pi_{13}^{lm} = \Pi_{31}^{lm} = \Pi_{24}^{lm} = \Pi_{42}^{lm} = \Pi_{34}^{lm} = \Pi_{43}^{lm} = 0 \quad (4.4.29)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{14}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{-i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{-i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{-i\phi} + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{-i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.30)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{23}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.31)$$

$$\Pi_{32}^{lm} = \Pi_{23}^{lm*} \quad (4.4.32)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{33}^{lm} = \Pi_{44}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^4 + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.33)$$

$$\Pi_{41}^{lm} = \Pi_{14}^{lm*} \quad (4.4.34)$$

$(l, m) = (3, 3)$, $(l, m) = (4, 4)$ のとき.

$$\begin{aligned} \Pi_{11}^{lm} = \Pi_{22}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^4 \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.35)$$

$$\Pi_{12}^{lm} = \Pi_{21}^{lm} = \Pi_{13}^{lm} = \Pi_{31}^{lm} = \Pi_{24}^{lm} = \Pi_{42}^{lm} = \Pi_{34}^{lm} = \Pi_{43}^{lm} = 0 \quad (4.4.36)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{14}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{-i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{-i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{-i\phi} + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{-i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.37)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{23}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{i\phi} + G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iYe^{i\phi} + G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iYe^{i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.38)$$

$$\Pi_{32}^{lm} = \Pi_{23}^{lm*} \quad (4.4.39)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{33}^{lm} = \Pi_{44}^{lm} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^4 + G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 + G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (4.4.40)$$

$$\Pi_{41}^{lm} = \Pi_{14}^{lm*} \quad (4.4.41)$$

$(l, m) = (1, 2), (l, m) = (1, 3), (l, m) = (2, 1), (l, m) = (3, 1), (l, m) = (2, 4), (l, m) = (3, 4), (l, m) = (4, 2), (l, m) = (4, 3)$ の場合, 任意の (l', m') に対して $\Pi_{l'm'}^{lm} = 0$

$(l, m) = (1, 4)$ のとき.

$$\begin{aligned} \Pi_{11}^{14} = \Pi_{22}^{14} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iYe^{-i\phi} + G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{-i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iYe^{-i\phi} - G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{-i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.42)$$

$$\Pi_{12}^{14} = \Pi_{21}^{14} = \Pi_{13}^{14} = \Pi_{31}^{14} = \Pi_{24}^{14} = \Pi_{42}^{14} = \Pi_{34}^{14} = \Pi_{43}^{14} = 0 \quad (4.4.43)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{14}^{14} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} - G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} + G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.44)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{23}^{14} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 - G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 + G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.45)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{32}^{14} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} + G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} - G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2e^{-2i\phi} \right] = -\Pi_{14}^{14} \end{aligned} \quad (4.4.46)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{41}^{14} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 + G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 - G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})Y^2 \right] = -\Pi_{23}^{14} \end{aligned} \quad (4.4.47)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{33}^{14} = \Pi_{44}^{14} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{-i\phi} + G_1^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{-i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k})G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iY^3e^{-i\phi} - G_4^R(\mathbf{k})G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})iYe^{-i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.48)$$

$(l, m) = (2, 3)$ のとき.

$$\begin{aligned} \Pi_{11}^{23} = \Pi_{22}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} - G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.49)$$

$$\Pi_{12}^{23} = \Pi_{21}^{23} = \Pi_{13}^{23} = \Pi_{31}^{23} = \Pi_{24}^{23} = \Pi_{42}^{23} = \Pi_{34}^{23} = \Pi_{43}^{23} = 0 \quad (4.4.50)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{14}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 - G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.51)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{23}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} - G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} + G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.52)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{22}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^3 e^{i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} - G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.53)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{32}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 - G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.54)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{33}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} - G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.55)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{41}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[-G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} \right. \\ & \left. + G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} - G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) Y^2 e^{2i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.56)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{33}^{23} = \Pi_{44}^{23} = \sum_{\mathbf{k}} N^4 & \left[G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} + G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} \right. \\ & \left. - G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY^3 e^{i\phi} - G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}) iY e^{i\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.4.57)$$

$\Pi_{l'm'}^{32}$, および $\Pi_{l'm'}^{41}$ は

$$\Pi_{l'm'}^{32} = \Pi_{m'l'}^{23*} \quad (4.4.58)$$

$$\Pi_{l'm'}^{41} = \Pi_{m'l'}^{14*} \quad (4.4.59)$$

である． $\Pi_{l'm'}^{lm}$ における波数積分は，式 (4.3.6) と同様に先に $E_{\mathbf{k}}$ 積分を行う． $\Pi_{l'm'}^{lm}$ において $E_{\mathbf{k}}$ 積分されるのはグリーン関数の二つの積， $G_{1/4}^R(\mathbf{k})G_{1/4}^A(\mathbf{q}-\mathbf{k})$ である．この積分は以下のようになる．

$$\begin{aligned} \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) &\sim \rho_0 \tau (1 - i\tau \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q} - (\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q})^2 \tau^2) \\ &= \rho_0 \tau (1 - iQ_x \cos \phi - iQ_y \sin \phi - Q_x^2 \cos^2 \phi - 2Q_x Q_y \cos \phi \sin \phi - Q_y^2 \sin^2 \phi) \end{aligned} \quad (4.4.60)$$

$$\rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = 0 \quad (4.4.61)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) &\sim \rho_0 \tau (1 + i\tau \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q} - (\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q})^2 \tau^2) \\ &= \rho_0 \tau (1 + iQ_x \cos \phi + iQ_y \sin \phi - Q_x^2 \cos^2 \phi - 2Q_x Q_y \cos \phi \sin \phi - Q_y^2 \sin^2 \phi) \end{aligned} \quad (4.4.62)$$

ここで $Q_x = (\gamma^2 |\mathbf{k}_F| / E_F) \tau q_x$ ， $Q_y = (\gamma^2 |\mathbf{k}_F| / E_F) \tau q_y$ と定義した． $\phi = \tan^{-1} k_y / k_x$ である．フェルミ面における角度平均を考える際に $\Pi_{l'm'}^{lm}$ の表式中に共通して現れる項について積分の結果を示すと以下のようになる．

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = \pi \rho_0 \tau (2 - Q^2) \quad (4.4.63)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = \pi \rho_0 \tau (2 - Q^2) \quad (4.4.64)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{i\phi} = \pi \rho_0 \tau (-iQ_x + Q_y) \quad (4.4.65)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{i\phi} = \pi \rho_0 \tau (iQ_x - Q_y) \quad (4.4.66)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{-i\phi} = -\pi \rho_0 \tau (iQ_x + Q_y) \quad (4.4.67)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{-i\phi} = \pi \rho_0 \tau (iQ_x + Q_y) \quad (4.4.68)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{2i\phi} = \frac{\pi \rho_0 \tau}{2} (-iQ_x + Q_y)^2 \quad (4.4.69)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{2i\phi} = \frac{\pi \rho_0 \tau}{2} (iQ_x - Q_y)^2 \quad (4.4.70)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_1^R(\mathbf{k}) G_1^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{-2i\phi} = \frac{\pi \rho_0 \tau}{2} (iQ_x + Q_y)^2 \quad (4.4.71)$$

$$\int d\phi \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_4^R(\mathbf{k}) G_4^A(\mathbf{q}-\mathbf{k}) e^{-2i\phi} = \frac{\pi \rho_0 \tau}{2} (iQ_x + Q_y)^2 \quad (4.4.72)$$

式 (4.4.63)-(4.4.72) を用いると $\Pi_{l'm'}^{lm}$ は以下のようになる．

$(l, m) = (1, 1), (l, m) = (2, 2)$ のとき

$$\Pi_{11}^{lm} = \Pi_{22}^{lm} = N^4 \pi \rho_0 \tau (1 + Y^4)(2 - Q^2) \quad (4.4.73)$$

$$\Pi_{23}^{lm} = \Pi_{32}^{lm*} = N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x - Q_y) \quad (4.4.74)$$

$$\Pi_{14}^{lm} = \Pi_{41}^{lm*} = N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x + Q_y) \quad (4.4.75)$$

$$\Pi_{33}^{lm} = \Pi_{44}^{lm} = N^4 \pi \rho_0 \tau Y^2 2(2 - Q^2) \quad (4.4.76)$$

$(l, m) = (3, 3), (l, m) = (4, 4)$ のとき

$$\Pi_{11}^{lm} = \Pi_{22}^{lm} = N^4 \pi \rho_0 \tau Y^2 2(2 - Q^2) \quad (4.4.77)$$

$$\Pi_{23}^{lm} = \Pi_{32}^{lm*} = N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x - Q_y) \quad (4.4.78)$$

$$\Pi_{14}^{lm} = \Pi_{41}^{lm*} = N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x + Q_y) \quad (4.4.79)$$

$$\Pi_{33}^{lm} = \Pi_{44}^{lm} = N^4 \pi \rho_0 \tau (1 + Y^4)(2 - Q^2) \quad (4.4.80)$$

$(l, m) = (1, 4)$ のとき

$$\Pi_{11}^{14} = \Pi_{22}^{14} = -N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x + Q_y) \quad (4.4.81)$$

$$\Pi_{14}^{14} = -\Pi_{32}^{14} = N^4 \pi \rho_0 \tau Y^2 (Q_y + iQ_x)^2 \quad (4.4.82)$$

$$\Pi_{41}^{14} = -\Pi_{23}^{14} = -N^4 \pi \rho_0 \tau Y^2 2(2 - Q^2) \quad (4.4.83)$$

$$\Pi_{44}^{14} = \Pi_{33}^{14} = -N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x + Q_y) \quad (4.4.84)$$

$(l, m) = (2, 3)$ のとき

$$\Pi_{11}^{23} = \Pi_{22}^{23} = -N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x + Q_y) \quad (4.4.85)$$

$$\Pi_{14}^{23} = -\Pi_{32}^{23} = N^4 \pi \rho_0 \tau 2(2 - Q^2) \quad (4.4.86)$$

$$\Pi_{41}^{23} = -\Pi_{23}^{23} = -N^4 \pi \rho_0 \tau Y^2 \pi (Q_y - iQ_x)^2 \quad (4.4.87)$$

$$\Pi_{44}^{23} = \Pi_{33}^{23} = -N^4 \pi \rho_0 \tau iY(1 + Y^2)(iQ_x + Q_y) \quad (4.4.88)$$

その他の成分についてはゼロである。以上により $\Pi_{l'm'}^{lm}$ の 256 成分が求まった。

4.4.2 $\hat{\Gamma}$ の計算

式 (4.4.6) において、左から $(\hat{I} - nu_0^2 \hat{\Pi})^{-1}$ を掛けることで Γ について解くことができる。 $(\hat{I} - nu_0^2 \hat{\Pi})^{-1}$ の計算には解析計算ソフトである Maple を用いた。解析計算ソフトを用いる際、式 (4.4.74)~(4.4.88) に共通で現れる因子 $N^4 \pi \rho_0 \tau$ と nu_0^2 の積について、

$$nu_0^2 N^4 \pi \rho_0 \tau = \frac{1}{2} \frac{1}{(Y^2 + 1)^2} \quad (4.4.89)$$

という関係を用いることで文字を削減できる． Γ について解いたあと， q^2 のオーダーまで残すと Γ の対角成分は以下ようになる．

$$\Gamma_{11}^{11} = \frac{16\lambda^4 \pi n u_0^2}{\gamma^2 \tau^2 (\lambda^6 + \lambda^2 - 2) q^2 + 4\lambda^2 (\lambda^2 - 1)} \quad (4.4.90)$$

$$\Gamma_{22}^{11} = \frac{(\lambda^2 - 1) \pi n u_0^2}{\gamma^2 \tau^2 (\lambda^2 + 1) q^2} \quad (4.4.91)$$

$$\Gamma_{33}^{11} = \frac{8\lambda^4 (3\lambda^2 + 1)^2 \pi n u_0^2}{\gamma^2 \tau^2 (7\lambda^8 - 8\lambda^6 - 2\lambda^4 + 3) q^2 + 24\lambda^8 + 32\lambda^6 + 8\lambda^4} \quad (4.4.92)$$

$$\Gamma_{44}^{11} = \frac{2(\lambda^2 + 1)^2 \pi n u_0^2}{\gamma^2 \tau^2 (2\lambda^4 - 3\lambda^2 + 1) q^2 + 2\lambda^2 + 2} \quad (4.4.93)$$

および

$$\Gamma_{11}^{11} = \Gamma_{22}^{22} = \Gamma_{33}^{33} = \Gamma_{44}^{44} \quad (4.4.94)$$

$$\Gamma_{22}^{11} = \Gamma_{11}^{22} = \Gamma_{44}^{33} = \Gamma_{33}^{44} \quad (4.4.95)$$

$$\Gamma_{33}^{11} = \Gamma_{44}^{22} = \Gamma_{11}^{33} = \Gamma_{22}^{44} \quad (4.4.96)$$

$$\Gamma_{44}^{11} = \Gamma_{33}^{22} = \Gamma_{22}^{33} = \Gamma_{11}^{44} \quad (4.4.97)$$

となる．非対角成分において， \mathbf{q} の角度積分後に有限に残る項は

$$\Gamma_{41}^{14} = \frac{2\pi(\lambda^2 - 1) n u_0^2}{\gamma^2 \tau^2 (\lambda^2 - 1) q^2 + 2} \quad (4.4.98)$$

および

$$\Gamma_{23}^{14} = \Gamma_{14}^{23} = \Gamma_{41}^{32} = \Gamma_{32}^{41} = \Gamma_{22}^{11} \quad (4.4.99)$$

$$\Gamma_{32}^{23} = \Gamma_{23}^{32} = \Gamma_{14}^{41} = \Gamma_{41}^{14} \quad (4.4.100)$$

となる． (m, n, m', n') のインデックスで指定されときの $\hat{\Gamma}$ の成分と 16×16 行列の成分の対応は付録 B にまとめた．

4.5 電気伝導度，および磁気伝導度に対する量子補正効果

電気伝導度に対する量子補正の効果 $\delta\sigma_{(0)}$ は図 4.5.1(a) は以下で与えられる．

$$\delta\sigma_{(0)}(L) = \frac{e^2 \hbar}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{v}_{\alpha\omega}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta}^x(-\mathbf{k}) G_{\alpha}^R(\mathbf{k}) G_{\beta}^R(-\mathbf{k}) G_{\omega}^A(\mathbf{k}) G_{\xi}^A(-\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \Gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{q}) \quad (4.5.1)$$

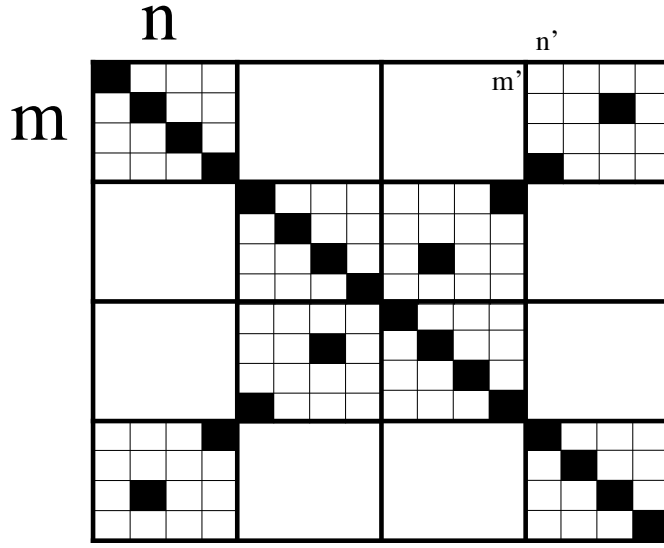


図 4.4.2 $\hat{\Gamma}$ の行列表示. \mathbf{q} の角度積分後に有限に残る成分を黒塗りで表した. 白塗りの成分はゼロを表す.

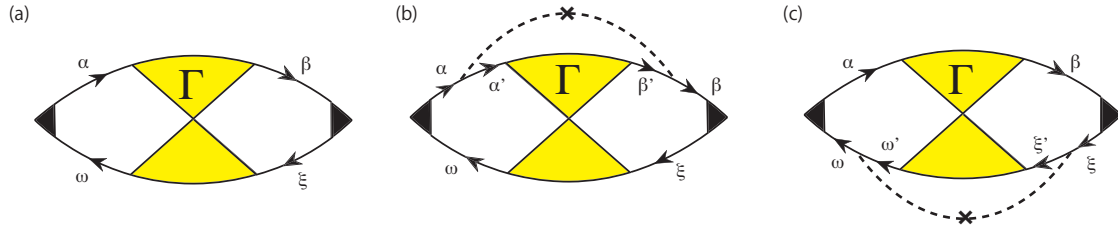


図 4.5.1 電気伝導度の量子補正効果を表すダイアグラム. 黒塗りの三角形のダイアグラムはパーテックス補正を表す. (a) 最低次のクーペロンによる電気伝導度の量子補正 $\delta\sigma_{(0)}$. (b)(c) クーペロンに対する二次の不純物散乱の効果を取り入れたダイアグラム. それぞれ式 (4.5.17), 式 (4.5.18) に対応する.

以下フェルミエネルギーが伝導帯にかかっているときを考える. $E_F\tau \gg 1$ が満たされている場合は $\alpha, \beta, \xi, \omega = \{1, 2\}$ 以外の成分は無視できる. 価電子帯の場合も同様である. グリーン関数に関する波数積分 $\sum_{\mathbf{k}} = \langle \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \rangle_F$ について, エネルギー積分は先に行うことができる,

$$\rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} G_{\alpha}^R(\mathbf{k}) G_{\beta}^R(-\mathbf{k}) G_{\omega}^A(\mathbf{k}) G_{\xi}^A(-\mathbf{k}) = 4\pi\rho_0\tau^3 \quad (4.5.2)$$

となる. 角度積分については式 (4.3.3) を考慮に入れると, 式 (4.5.1) において $(\alpha, \beta, \xi, \omega) = (1, 1, 1, 1)$ および $(\alpha, \beta, \xi, \omega) = (1, 2, 2, 1)$ のときを考えればよい. 式 (4.4.3) において,

$\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 \rightarrow -\mathbf{k}$, $\mathbf{q} \rightarrow 0$ として, 式 (4.5.1) に代入すると,

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{(0)}(L) = & \frac{e^2\hbar}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \tilde{v}_{\alpha\omega}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta}^x(-\mathbf{k}) G_{\alpha}^R(\mathbf{k}) G_{\beta}^R(-\mathbf{k}) G_{\omega}^A(\mathbf{k}) G_{\xi}^A(-\mathbf{k}) \\ & \times \langle \beta, -\mathbf{k} | n \rangle \langle \omega, \mathbf{k}_2 | n' \rangle \langle m | \alpha, \mathbf{k} \rangle \langle m' | \xi, -\mathbf{k} \rangle \Gamma_{m'n'}^{mn}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.5.3)$$

となる. さらに変形すると

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{(0)}(L) = & \frac{e^2\hbar}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}} \rho_0 \int dE_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\pi} \int d\phi \tilde{v}_{\alpha\omega}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta}^x(-\mathbf{k}) G_{\alpha}^R(\mathbf{k}) G_{\beta}^R(-\mathbf{k}) G_{\omega}^A(\mathbf{k}) G_{\xi}^A(-\mathbf{k}) \\ & \times \langle \beta, -\mathbf{k} | n \rangle \langle \omega, \mathbf{k}_2 | n' \rangle \langle m | \alpha, \mathbf{k} \rangle \langle m' | \xi, -\mathbf{k} \rangle \Gamma_{m'n'}^{mn}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.5.4)$$

となる. 式 (4.5.2) を用いると以下のようになる.

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{(0)}(L) = & \frac{e^2\hbar}{2\pi} 4\pi\rho_0\tau^3 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2\pi} \int d\phi \tilde{v}_{\alpha\omega}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta}^x(-\mathbf{k}) \\ & \times \langle \beta, -\mathbf{k} | n \rangle \langle \omega, \mathbf{k}_2 | n' \rangle \langle m | \alpha, \mathbf{k} \rangle \langle m' | \xi, -\mathbf{k} \rangle \Gamma_{m'n'}^{mn}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (4.5.5)$$

次に以下の \mathbf{k} の角度 ϕ に依存する部分の角度積分, Ξ について考える.

$$\Xi_{\alpha\beta\xi\omega} = \frac{1}{2\pi} \int d\phi \tilde{v}_{\alpha\omega}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta}^x(-\mathbf{k}) \langle \beta, -\mathbf{k} | n \rangle \langle \omega, \mathbf{k}_2 | n' \rangle \langle m | \alpha, \mathbf{k} \rangle \langle m' | \xi, -\mathbf{k} \rangle \Gamma_{m'n'}^{mn}(\mathbf{q}). \quad (4.5.6)$$

$(\alpha, \beta, \xi, \omega) = (1, 1, 1, 1)$ のとき,

$$\begin{aligned} \Xi_{1111} = & -\frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^6 \Gamma_{44}^{44} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^6 \Gamma_{33}^{44} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{23}^{14} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{22}^{44} \\ & + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{11}^{44} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{41}^{14} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^6 \Gamma_{44}^{33} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{14}^{23} \\ & - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^6 \Gamma_{33}^{33} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^6 \Gamma_{22}^{33} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{32}^{23} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{11}^{33} \\ & - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{44}^{22} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{23}^{32} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{33}^{22} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^2 \Gamma_{22}^{22} \\ & + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{41}^{32} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^2 \Gamma_{11}^{22} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{14}^{41} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{44}^{11} \\ & - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{33}^{11} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^4 \Gamma_{32}^{41} + \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^2 \Gamma_{22}^{11} - \frac{1}{2} N^8 \gamma^2 Y^2 \Gamma_{11}^{11}. \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

$(\alpha, \beta, \xi, \omega) = (1, 2, 2, 1)$ のとき，

$$\begin{aligned}
\Xi_{1221} = & -\frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{44}^{44} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{33}^{44} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{23}^{14} + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{22}^{44} \\
& + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{11}^{44} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{41}^{14} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{44}^{33} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{14}^{23} \\
& - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{33}^{33} + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{22}^{33} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{32}^{23} + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{11}^{33} \\
& + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{44}^{22} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_7^{10} + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{33}^{22} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^2\Gamma_{22}^{22} \\
& - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{41}^{32} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^2\Gamma_{11}^{22} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{14}^{41} + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{44}^{11} \\
& + \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{33}^{11} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{32}^{41} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^2\Gamma_{22}^{11} - \frac{1}{2}N^8\gamma^2Y^2\Gamma_{11}^{11}. \quad (4.5.8)
\end{aligned}$$

式 (4.5.7) と式 (4.5.8) の和を取ると，

$$\begin{aligned}
\Xi_{1111} + \Xi_{1221} = & N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{41}^{14} + N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{11}^{44} + N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{14}^{41} - N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{33}^{33} \\
& + N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{44}^{11} - N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{23}^{32} - N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{32}^{23} - N^8\gamma^2Y^6\Gamma_{44}^{44} \\
& - N^8\gamma^2Y^2\Gamma_{22}^{22} - N^8\gamma^2Y^2\Gamma_{11}^{11} + N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{22}^{33} + N^8\gamma^2Y^4\Gamma_{33}^{22} \\
& = N^8\gamma^2Y^2(\Gamma_{11}^{11} + \Gamma_{22}^{22}) + N^8\gamma^2Y^6(\Gamma_{33}^{33} + \Gamma_{44}^{44}) \\
& + N^8\gamma^2Y^4(\Gamma_{44}^{11} - \Gamma_{41}^{14} - \Gamma_{14}^{41} + \Gamma_{11}^{44}) \\
& + N^8\gamma^2Y^4(\Gamma_{33}^{22} - \Gamma_{32}^{23} - \Gamma_{23}^{32} + \Gamma_{22}^{33}) \quad (4.5.9)
\end{aligned}$$

となる．ここまでの計算で残ってきた Γ の成分について Wolff ハミルトニアン基底の表示 (付録 B 参照) で見ると，

$$\Gamma_{11}^{11} + \Gamma_{22}^{22} = \langle c \uparrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow c \uparrow \rangle + \langle c \downarrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow c \downarrow \rangle \quad (4.5.10)$$

$$\Gamma_{33}^{33} + \Gamma_{44}^{44} = \langle v \uparrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow v \uparrow \rangle + \langle v \downarrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow v \downarrow \rangle \quad (4.5.11)$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{44}^{11} - \Gamma_{41}^{14} - \Gamma_{14}^{41} + \Gamma_{11}^{44} = & \langle c \uparrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow v \downarrow \rangle - \langle v \downarrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow v \downarrow \rangle \\
& - \langle c \uparrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow c \uparrow \rangle + \langle v \downarrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow c \uparrow \rangle \\
& = (\langle c \uparrow v \downarrow | - \langle v \downarrow c \uparrow |) \hat{\Gamma} (| c \uparrow v \downarrow \rangle - | v \downarrow c \uparrow \rangle) \quad (4.5.12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{33}^{22} - \Gamma_{32}^{23} - \Gamma_{23}^{32} + \Gamma_{22}^{33} = & \langle c \downarrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow v \uparrow \rangle - \langle v \uparrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow v \uparrow \rangle \\
& - \langle c \downarrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow c \downarrow \rangle + \langle v \uparrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow c \downarrow \rangle \\
& = (\langle c \downarrow v \uparrow | - \langle v \uparrow c \downarrow |) \hat{\Gamma} (| c \downarrow v \uparrow \rangle - | v \uparrow c \downarrow \rangle) \quad (4.5.13)
\end{aligned}$$

となる．したがって，式 (4.5.10)，(4.5.11) がバンド内三重項，式 (4.5.12)，(4.5.13) がバンド間一重項である．表 3 にクーパー不安定性をもつ Γ の成分についてまとめた．バンド

内三重項とバンド間一重項のみが残るという点は第3章の結果と定性的に等しい。しかし式 (4.5.11) を見て分かるように、 $|v\uparrow v\uparrow\rangle$, $|v\downarrow v\downarrow\rangle$ という価電子帯の三重項も発散的な寄与を与える点が第3章の結果とは異なる (第3章では発散的な寄与を与えないとして無視していた)。ただし価電子帯の三重項の寄与は伝導帯の三重項の寄与 (式 (4.5.9)) と係数 $Y^4 = (\lambda - 1)^2/(\lambda + 1)^2$ だけ異なる。Y は式 (1.3.41) を見て分かるように Wolff ハミルトニアン の SOC 項 $\sigma \cdot \mathbf{k}$ による混成の強度に対応する。 E_F/Δ が 1 よりも大きくなると SOC の効果によって価電子帯の三重項のクーパー不安定性が誘起される。 E_F/Δ が 1 に十分近いときは伝導帯の三重項が優勢になるため、第3章の節 3.4 で行った解析に変更は生じない。本章の計算のようにすべてのエネルギー固有状態間の遷移を考慮した場合でも、バンド内三重項 $|c\uparrow c\downarrow\rangle + |c\downarrow c\uparrow\rangle$, およびバンド内一重項 $|c\uparrow c\downarrow\rangle - |c\downarrow c\uparrow\rangle$ は第3章と同様に現れない。このことは $k_z = 0$ の系に特有の性質であることが示唆される。また式 (4.4.95), 式 (4.4.99) で与えられる, Γ_{22}^{11} , Γ_{11}^{22} , Γ_{44}^{33} , Γ_{33}^{44} , Γ_{23}^{14} , Γ_{14}^{23} , Γ_{41}^{32} , Γ_{32}^{41} の 8 個は励起ギャップがゼロのクーペロンを与えるが, 式 (4.5.7) と式 (4.5.8) の和を取る過程ですべてキャンセルされ最終的には現れない。

表 3 クーパー不安定性をもつ Γ の成分.

三重項	一重項
$ c\uparrow\rangle \otimes c\uparrow\rangle, c\downarrow\rangle \otimes c\downarrow\rangle$	$ c\uparrow\rangle \otimes v\downarrow\rangle - v\downarrow\rangle \otimes c\uparrow\rangle,$
$ v\uparrow\rangle \otimes v\uparrow\rangle, v\downarrow\rangle \otimes v\downarrow\rangle$	$ c\downarrow\rangle \otimes v\uparrow\rangle - v\uparrow\rangle \otimes c\downarrow\rangle$

式 (4.5.9) を式 (4.5.5) に代入し, \mathbf{q} 積分を実行すると, 電気伝導度に対する量子補正は,

$$\delta\sigma_{(0)} = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \beta_i \log \frac{\ell_0^{-2} + \ell_i^{-2}}{L^{-2} + \ell_i^{-2}} \quad (4.5.14)$$

となる。ただし

$$\begin{aligned} \alpha_t &= -\frac{2(\lambda^2 + 1)}{\lambda^4 + \lambda^2 + 2}, \quad \alpha_s = \frac{\lambda^2 - 1}{2(2\lambda^2 - 1)} \\ \ell_t^{-2} &= \frac{X_t}{D_0\tau}, \quad \ell_s^{-2} = \frac{X_s}{D_0\tau} \\ X_t &= \frac{2\lambda^2 - 2}{\lambda^4 + \lambda^2 + 2}, \quad X_s = \frac{1}{2\lambda^2 - 1} \end{aligned} \quad (4.5.15)$$

とおいた。バンド内三重項, バンド間一重項に比例する寄与をそれぞれ t , s とおいた。 D_0 は拡散定数で,

$$D_0 = \frac{v_F^2\tau}{2} = \frac{\gamma^2(E_F^2 - \Delta^2)}{2E_F^2}\tau \quad (4.5.16)$$

である．クーペロンに対する最低次の補正を加えた，電気伝導度の量子補正効果の表式 (図 4.5.1 (b), (c)) は以下のように表せる．

$$\delta\sigma_a = \frac{e^2\hbar}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{q}} \tilde{v}_{\alpha'\omega'}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta'}^x(-\mathbf{k}_1) G_{\alpha'}^R(\mathbf{k}) G_{\alpha}^R(\mathbf{k}_1) G_{\beta}^R(-\mathbf{k}) G_{\beta'}^R(-\mathbf{k}_1) G_{\xi}^A(-\mathbf{k}_1) G_{\omega}^A(\mathbf{k}) \Gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \langle\langle \alpha, \mathbf{k}_1 | V(\mathbf{r}) | \alpha', \mathbf{k} \rangle \langle \beta', -\mathbf{k}_1 | V(\mathbf{r}) | \beta, -\mathbf{k} \rangle \rangle_{\text{imp}} \quad (4.5.17)$$

$$\delta\sigma_b = \frac{e^2\hbar}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{q}} \tilde{v}_{\alpha\omega'}^x(\mathbf{k}) \tilde{v}_{\xi\beta}^x(-\mathbf{k}_1) G_{\alpha}^R(\mathbf{k}) G_{\beta}^R(-\mathbf{k}_1) G_{\xi'}^A(-\mathbf{k}_1) G_{\xi}^A(-\mathbf{k}) G_{\omega}^A(\mathbf{k}_1) G_{\omega'}^A(\mathbf{k}) \times \Gamma_{\xi\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \langle\langle \xi, -\mathbf{k}, | V(\mathbf{r}) | \xi', -\mathbf{k}_1 \rangle \langle \omega', \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \omega, \mathbf{k}_1 \rangle \rangle_{\text{imp}} \quad (4.5.18)$$

$\delta\sigma_{(0)}$ と同様に計算を行うと $\delta\sigma_{t/s,a}$ は

$$\delta\sigma_{t/s,a} = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \eta_{H,t/s} \alpha_t D_0 \int dq \frac{1}{D_0 q^2 + X_{t/s} \tau^{-1}} \quad (4.5.19)$$

$$\eta_{H,t} = \frac{\lambda^4 + 6\lambda^2 + 1}{16\lambda^2(\lambda^2 + 1)} \quad (4.5.20)$$

$$\eta_{H,s} = \frac{\lambda^2 - 1}{4\lambda^2} \quad (4.5.21)$$

である． $\eta_{H,t}$, $\eta_{H,s}$ はそれぞれバンド内三重項，一重項のクーペロンに対する補正を表す．また $\delta\sigma_{t/s,b} = \delta\sigma_{t/s,a}$ である． $\eta_{H,s}$ は $\lambda \rightarrow \infty$ で $1/4$ となりグラフェンの結果を再現する [10, 81, 100]．図 4.5.2, 4.5.3, 4.5.4 に α , $\eta_{t/s}$, $\ell_{t/s}$ それぞれの E_F/Δ 依存性をプロットした． α_s , α_t は一重項と三重項の強さを特徴付けるパラメーターである．第 3 章の計算では $E_F/\Delta \sim 3$ で一重項と三重項の強さが等しくなる [53]．すべての状態遷移を取り入れた場合， $E_F/\Delta \sim 2.5$ となり 3 からずれる．

最終的に磁気伝導度 $\delta\sigma(B) = \delta\sigma_{(0)}(B) + \delta\sigma_{(1a)}(B) + \delta\sigma_{(1b)}(B)$ は

$$\delta\sigma(B) = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \sum_i \alpha_i (1 + \eta_{H,i}) \eta_v^2 \left[\psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_i^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_i^2} + \frac{\ell_B^2}{\ell_\phi^2} \right) \right] \quad (4.5.22)$$

となる．図 4.5.5 に磁場依存性をプロットした． λ を変えることにより WL-WAL クロスオーバーが起きる．この結果はこれまでの SOC 格子系における理論の結果と定性的に一致する．

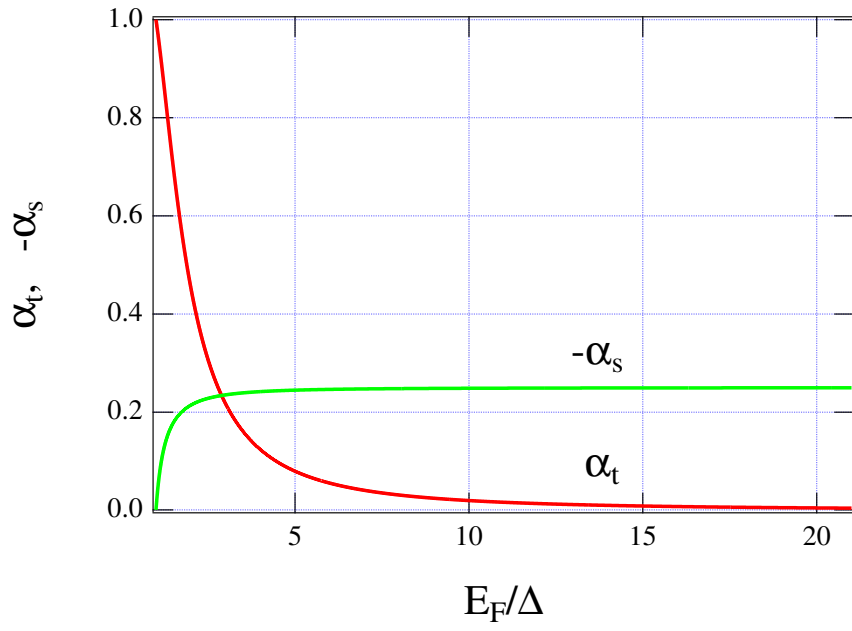


図 4.5.2 α_t と α_s の E_F/Δ 依存性.

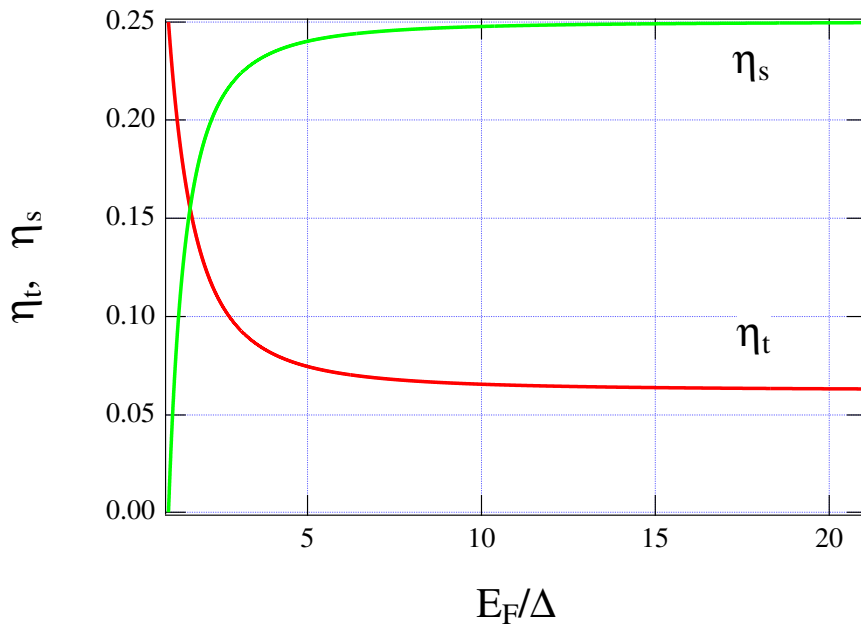
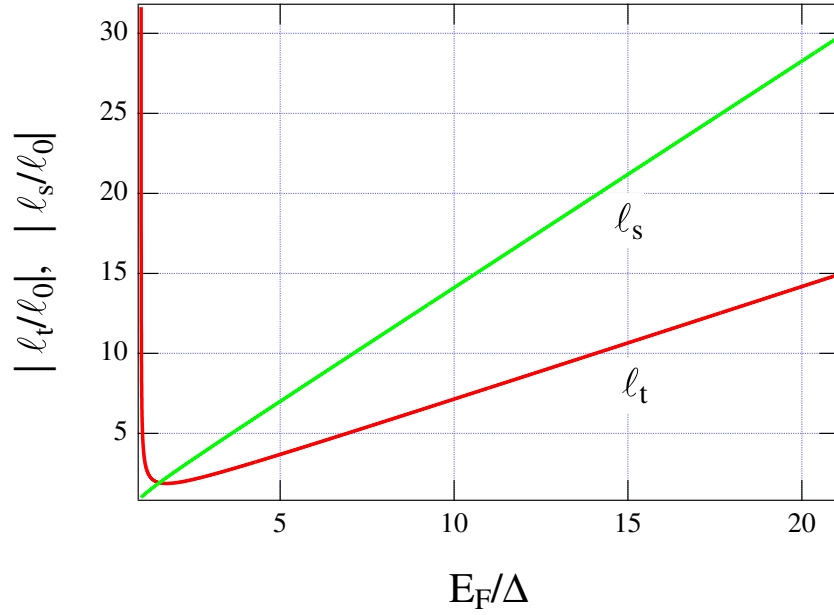
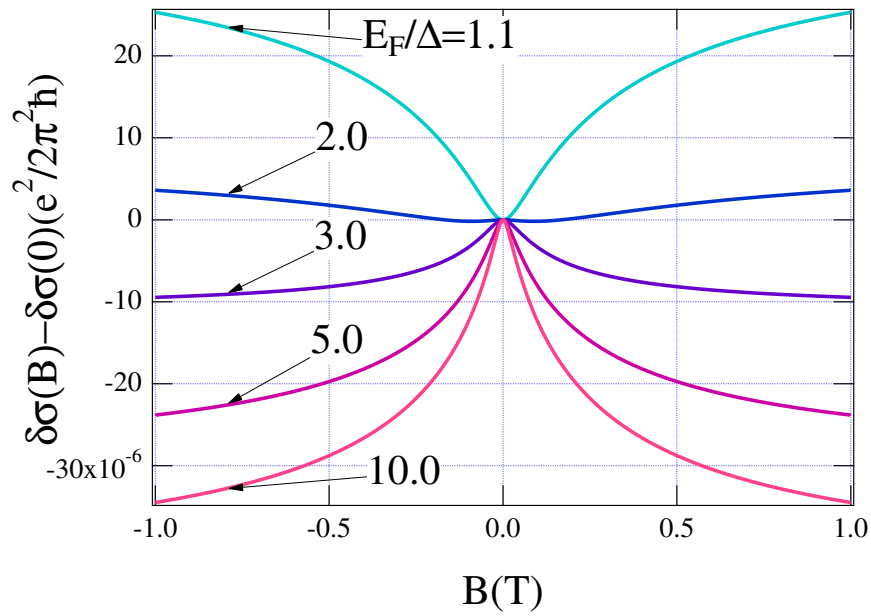


図 4.5.3 η の E_F/Δ 依存性.

図 4.5.4 ℓ_s と ℓ_t の E_F/Δ 依存性.図 4.5.5 電気伝導度の量子補正効果の磁場依存性. $E_F/\Delta = 1.1, 2.0, 3.0, 5.0, 10.0$ としてプロットした.

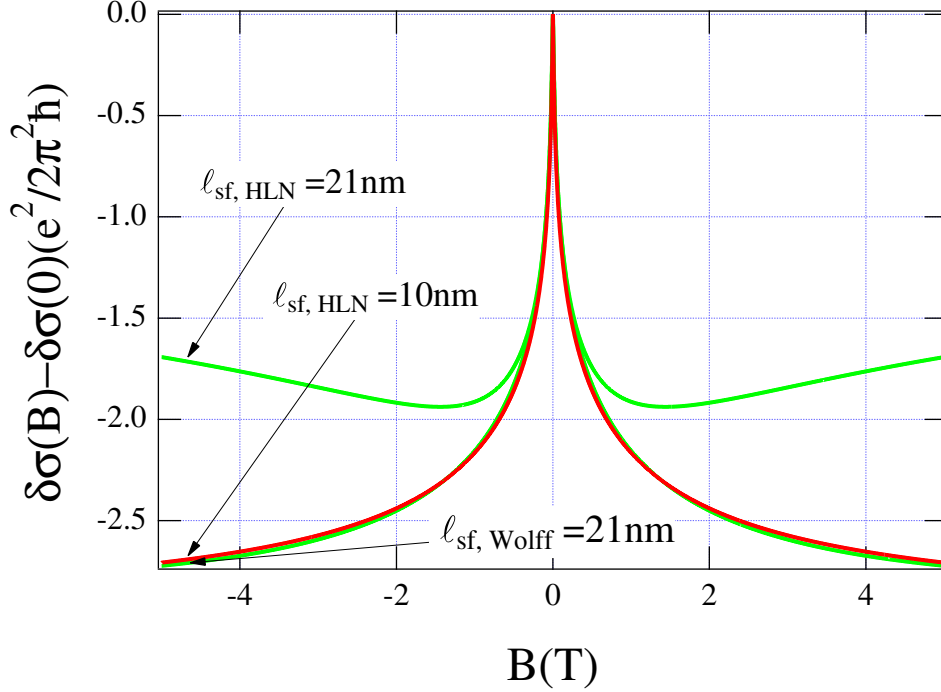


図 4.6.1 磁気伝導度の Wolff と HLN の比較. Wolff において, $\ell_\phi = 520\text{nm}$, $\ell = 15\text{nm}$, $E_F/\Delta = 20$ とした. HLN に対しては, $\ell_\phi = 300\text{nm}$, $\ell_0 = 10\text{nm}$, $\ell_{so} = 12\text{nm}$ とした.

4.6 スピン緩和長について

式 (4.5.22) を用いて実験の解析を行う場合, フィットティングパラメータは全緩和長 ℓ と $\lambda = E_F/\Delta$ である. これらから式 (4.2.5)-(4.2.7) を通して運動量緩和長 ℓ_0 , バンド内スピン緩和長 $\ell_{\text{Intra,sf}}$, バンド間スピン緩和長 $\ell_{\text{Inter,sf}}$ が得られる. 全緩和長とそれぞれの緩和長の関係は式 (4.2.5)-(4.2.7) を用いて,

$$\ell_0 = \sqrt{2}\ell, \quad \ell_{\text{Intra,sf}} = \sqrt{2}\lambda\ell, \quad \ell_{\text{Inter,sf}} = \sqrt{\frac{2\lambda^2}{\lambda^2 - 1}}\ell \quad (4.6.1)$$

$$\ell_{\text{sf,Wolff}}^{-2} = \ell_{\text{Intra,sf}}^{-2} + \ell_{\text{Inter,sf}}^{-2} \quad (4.6.2)$$

である. $\delta\sigma$ と HLN 公式 (3.3.1) との比較を行い図 (4.6.1) にプロットした. このとき, Wolff におけるパラメータは $\ell_\phi = 520\text{nm}$, $\ell = 15\text{nm}$, $E_F/\Delta = 20$ である. このとき運動量緩和長およびスピン緩和長は $\ell_{0,\text{Wolff}} = \ell_{\text{sf,Wolff}} = 21\text{nm}$ となる. HLN におけるパラメータは

$\ell_\phi = 300\text{nm}$, $\ell_0 = 10\text{nm}$, $\ell_{\text{so}} = 12\text{nm}$ とした. スピン緩和時間とスピン軌道緩和時間には $1/\tau_{\text{sf}} \sim 4/(3\tau_{\text{so}})$ という関係がある [58]. この関係を用いるとスピン軌道長 ℓ_{so} と HLN のスピン緩和長 $\ell_{\text{sf,HLN}}$ の関係は $\ell_{\text{sf,HLN}} \sim \sqrt{3}/(2\ell_{\text{so}})$ となる. したがって HLN のスピン緩和長は $\ell_{\text{sf,HLN}} = 10\text{nm}$ となる. 関数系は同じであるものの $\delta\sigma_W$ で得られるスピン緩和長の方が HLN のものよりも 2 倍程度長くなることがわかる. また HLN のスピン緩和長を $\ell_{\text{sf,HLN}} = 21\text{nm}$ とした場合, $\delta\sigma$ とは明らかに異なるふるまいをする.

表 4 SOC 格子系と HLN 理論で得られた緩和長

	SOC 格子系	HLN 公式
位相緩和長 ℓ_ϕ	520nm	300nm
運動量緩和長 ℓ_0	21nm	10nm
スピン緩和長 ℓ_{sf}	21nm	10nm

SOC 存在下において, 格子欠陥やフォノン散乱のようなスピンの依存しない散乱体による同バンド内のスピン緩和のメカニズムは Elliott-Yafet 機構として知られている [33]. 我々の結果によると, 同バンド内でのスピン緩和は λ が増大するほど抑制されることが分かる. しかし λ の増大はバンド間効果によりバンド間のスピン緩和を増大させる. 両者の遷移確率の和は運動量が緩和する確率に等しい. したがって運動量緩和長とスピン緩和長は等しくなる. 運動量緩和は不純物濃度によって決まるため, 純度の高い試料であれば SOC が強い系においてもスピン緩和長は長くなる.

結論

本論文では、SOC 格子系における電気伝導度に対する量子補正効果の計算を行った。

第 3 章では Wolff ハミルトニアンに基づき、二次元 SOC 格子系における磁気伝導度に対する量子補正効果の解析的表式を導出した。希薄 SOC 系の量子補正効果の理論である HLN 理論との差異を明確にした。従来理論における WAL の機構と本研究の非従来型の WAL の機構の違いを示した。希薄 SOC 系、SOC 格子系によらずスピントリッップを伴う散乱を考慮しない場合、バンド内一重項とバンド内三重項のクーペロンは縮退し互いに打ち消すため WAL は生じない。従来理論ではスピントリッップを伴う散乱を考慮することにより、バンド内一重項とバンド内三重項のクーペロンの縮退が解け、結果として WAL が生じると理解されていた。しかし SOC 格子系の場合、SOC のバンド間効果によってバンド間一重項のクーパー不安定性が生じることを示した。その結果バンド間一重項のクーペロンが WAL に寄与することを明らかにした。本研究と従来理論のクーペロンの成分の違いにより磁場依存性に明確な違いが現れることを示した。HLN 理論では伝導度の磁場依存性に明確な極値を生じる一方で、SOC 格子系では明確な極値が生じないことが明らかとなった。これは SOC 格子系である Bi において実験的に観測されている事実と一致する。 E_F/Δ を変化させることにより WAL-WL クロスオーバーが SOC 格子系で起きることが期待される。このクロスオーバーは $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ や圧力下での PbTe において観測できることを示した。

第 4 章では不純物散乱によるすべての状態遷移を含めて量子補正効果の計算を行った。定性的な議論に留まっていた第 3 章の結果をより定量的なものにした。具体的にはすべてのエネルギー固有状態間の遷移、バーテックス補正、クーペロンに対する二次の補正を考慮した。すべてのエネルギー固有状態間の遷移を考えるため、解くべき Bethe-Salpeter 方程式は 16×16 の行列となる。この Bethe-Salpeter 方程式を $E_F\tau \gg 1$ が満たされる範囲で厳密に解いた。Bethe-Salpeter 方程式の対角要素は 16 成分あるのでクーペロンは少なくとも 16 種類のものが存在しうる。しかし結果は多くの項が相殺し、最終的には第 3 章と同様にバンド内三重項とバンド間一重項のみが残ることが示された。第 3 章との違いとして、価電子帯

同士の電子が三重項を組んだクーペロンが量子補正効果に寄与することを明らかにした．表 5 に第 3 章および第 4 章で得られた，SOC 格子系においてクーパー不安定性を与える Γ の成分をまとめた．

表 5 SOC 格子系におけるクーパー不安定性をもつ Γ の成分のまとめ．

	三重項	一重項
第 3 章 (対角の過程のみ)	$ c \uparrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle, c \downarrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle$	$ c \uparrow\rangle \otimes v \downarrow\rangle - v \downarrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle,$ $ c \downarrow\rangle \otimes v \uparrow\rangle - v \uparrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle$
第 4 章 (すべての状態遷移を考慮)	$ c \uparrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle, c \downarrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle,$ $ v \uparrow\rangle \otimes v \uparrow\rangle, v \downarrow\rangle \otimes v \downarrow\rangle$	$ c \uparrow\rangle \otimes v \downarrow\rangle - v \downarrow\rangle \otimes c \uparrow\rangle,$ $ c \downarrow\rangle \otimes v \uparrow\rangle - v \uparrow\rangle \otimes c \downarrow\rangle$

SOC 格子系では E_F/Δ が大きくなるほどバンド内スピン緩和長が長くなり，バンド間スピン緩和長が短くなることを示した．スピン緩和長について HLN 理論と比較を行なったところ，SOC 格子系におけるスピン緩和長は HLN 公式で得られるものよりも 2 倍程度長くなることを明らかにした．SOC 格子系ではスピン緩和長は運動量緩和長に等しいことを示した．運動量緩和長は不純物濃度によって決まるため，純度の高い試料であれば，たとえ SOC が強くともスピンは緩和しにくいということが結論付けられる．この事実はスピンホール効果を用いたスピン電流変換を考える際に重要である．SOC 格子系において高いスピン電流変換効率と長いスピン緩和長を実現するためには外因的なスピンホール効果よりも内因性スピンホールが有利であるといえる．

付録 A 線形応答理論

付録では久保公式の導出方法について記す。

密度行列と運動方程式

微視的な視点において物理量とは量子力学的な期待値である。一方、我々が目にする物理量とは粒子一個の期待値ではなく、すべての粒子がもつ物理量の統計平均である。この二つの確率操作を結びつける演算子が密度行列である。密度行列とは一言で言えば量子力学における期待値の確率分布の和である。この節では密度行列を導入し、運動方程式を導く。観測量 A の統計平均は

$$\langle A \rangle \equiv \sum_i w_i \langle \alpha^i | A | \alpha^i \rangle \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。 w_i は各期待値に対して重みを与える係数である。恒等演算子 $\sum_b |b\rangle \langle b|$ を用いることにより、

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} \langle \alpha^i | b' \rangle \langle b' | A | b'' \rangle \langle b'' | \alpha^i \rangle \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \left(\sum_i w_i \langle b'' | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | b' \rangle \right) \langle b' | A | b'' \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

ここで密度演算子 ρ を

$$\rho \equiv \sum_i w_i | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \quad (\text{A.3})$$

と定義する。こうすると基底 $|b\rangle$ において行列要素が

$$\langle b'' | \rho | b' \rangle = \sum_i w_i \langle b'' | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | b' \rangle \quad (\text{A.4})$$

と表される。これを密度行列と呼ぶ [91]。これを用いると式 (A.2) は

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | \rho | b' \rangle \langle b' | A | b'' \rangle \\ &= \text{Tr}(\rho A) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

となる。次に密度演算子の式 (A.3) の時間発展を考える。まず初期時刻 t_0 での状態 $|\alpha^i, t_0\rangle$ が時間発展し状態 $|\alpha^i, t\rangle$ になったとする。これは時間発展演算子を $U(t)$ とすると、

$$|\alpha^i, t\rangle = U(t) |\alpha^i, t_0\rangle \quad (\text{A.6})$$

と書くことができる。式 (A.3) において時間依存性をあらわに書くと、

$$\rho(t) = \sum_i w_i |\alpha^i, t\rangle \langle \alpha^i, t| \quad (\text{A.7})$$

ただし各状態 $|\alpha^i\rangle$ の分布の割合 w_i は変化しないと仮定する。 $|\alpha^i, t\rangle$ はシュレーディンガー方程式を満たすので、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_i w_i (H |\alpha^i, t\rangle \langle \alpha^i, t| - |\alpha^i, t\rangle \langle \alpha^i, t| H) \\ &= -[\rho, H] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

となる。これが密度行列の運動方程式である。von Neumann 方程式とも呼ばれる。

久保公式の導出

外場が加わる前の平衡状態を無限の過去 ($-\infty$) とし、そこから徐々に摂動を加えて今の状態が実現した、と仮定する。これは断熱的スイッチングの仮定と呼ばれる。この仮定のもとに外場 $F(t)$ 、および外場と結合する応答を A とし、一粒子ハミルトニアンを以下のように定義する。

$$H = H_0 - AF(t) \quad (\text{A.9})$$

ただし A は演算子であり、 $F(t)$ は演算子ではないことに注意する。密度行列に対して、一粒子系のカノニカル集団を考える。

$$\rho_0 = \frac{e^{-\beta H_0}}{Z} \quad (\text{A.10})$$

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H_0} \quad (\text{A.11})$$

となる。弱い外場下において、密度行列は無摂動部分と外場の一次に比例する項に分けることができ、以下ようになる。

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho \quad (\text{A.12})$$

式 (A.9) と式 (A.12) を式 (A.8) に代入すると

$$i\hbar \frac{\partial \delta \rho}{\partial t} = -[\rho_0, -AF(t)] - [\delta \rho, H_0] - [\delta \rho, -AF(t)] \quad (\text{A.13})$$

右辺第三項は外場の二次の寄与を与えるので無視する．ここで以下の関係で与えられる g を導入する．

$$\delta \rho = \exp \left(-i \frac{H_0 t}{\hbar} \right) g \exp \left(i \frac{H_0 t}{\hbar} \right) \quad (\text{A.14})$$

これを式 (A.13) に代入する．

$$i\hbar \frac{\partial g}{\partial t} = -\exp \left(i \frac{H_0 t}{\hbar} \right) [\rho_0, -AF(t)] \exp \left(-i \frac{H_0 t}{\hbar} \right) \quad (\text{A.15})$$

これを t に関して積分すると

$$i\hbar \{g(t) - g(-\infty)\} = - \int_{-\infty}^t dt' \exp \left(i \frac{H_0 t}{\hbar} \right) [\rho_0, -AF(t')] \exp \left(-i \frac{H_0 t}{\hbar} \right) \quad (\text{A.16})$$

となる． $g(-\infty)$ は平衡状態にあるので 0 である． $\delta \rho$ の表式に戻すと

$$\delta \rho = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i \frac{H_0}{\hbar}(t-t')} [\rho_0, -AF(t')] e^{i \frac{H_0}{\hbar}(t-t')} \quad (\text{A.17})$$

となる．したがって観測量 B の統計平均は

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \text{Tr} \rho B \\ &= \text{Tr} \rho_0 B + \text{Tr} \delta \rho B \\ &= \langle B \rangle_0 - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \{ e^{-i \frac{H_0}{\hbar}(t-t')} [\rho_0, -AF(t')] e^{i \frac{H_0}{\hbar}(t-t')} B \} \\ &= \langle B \rangle_0 - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \{ [\rho_0, -AF(t')] B(t-t') \} \\ &= \langle B \rangle_0 - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \{ \rho_0 [-AF(t'), B(t-t')] \} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

第一項は平衡状態での期待値を表しており，第二項が外場に対する線形応答を表す．

電気伝導度の導出

ここから電気伝導度の表式を求めていく． $B(t)$ をベクトルポテンシャルが存在する元での電流密度演算子 $j_x(t) - Ne^2 A_x/m$ とし，外場 $F(t)$ をベクトルポテンシャル $A_x(t)$ とする． N は全粒子数である．また A は電場方向の電流密度演算子で $j_x(t=0)$ とする．ここ

で、空間的に一様な系の場合、 j の空間依存性は無視できること、および電場が一様な状況を仮定している。電流の期待値は

$$\langle j_x \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\{\rho_0[j_x(t'-t), j_x(t=0)]\} A_x(t') - \frac{Ne^2}{m} A_x(t) \quad (\text{A.19})$$

となる。 $A_x(t) = A_x(\omega)e^{-i\omega t + \epsilon t}$, $E_x(\omega)/i\omega = A_x(\omega)$, $j_x(t) = j_x(\omega)e^{-i\omega t + \epsilon t}$ とすると

$$j_x(\omega) = -\frac{1}{i\omega} \int_0^\infty dt \frac{1}{i\hbar} \langle [j_x(t), j_x(t=0)] \rangle e^{i\omega t - \epsilon t} E_x(\omega) - \frac{Ne^2}{mi\omega} E_x(\omega) \quad (\text{A.20})$$

ここで遅延相関関数 $\Phi_{xx}(\omega)$ を以下のように定義する。

$$\Phi_{xx}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \langle [j_x(t), j_x(t=0)] \rangle e^{i\omega t - \epsilon t} \quad (\text{A.21})$$

また $\Phi_{xx}(0)$ を計算すると

$$\begin{aligned} \Phi_{xx}(0) &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \langle [j_x(t), j_x(t=0)] \rangle e^{-\epsilon t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{i,j} e^2 \langle x_i(0) \dot{x}_j - \dot{x}_j x_i(0) \rangle \\ &= \frac{Ne^2}{m} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

となる。式 (A.21) と式 (A.22) を用いることにより式 (A.20) は

$$j_x(\omega) = \frac{1}{i\omega} [\Phi_{xx}(\omega) - \Phi_{xx}(0)] E_x(\omega) \quad (\text{A.23})$$

となる。したがって電気伝導度は

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{1}{i\omega} [\Phi_{xx}(\omega) - \Phi_{xx}(0)] \quad (\text{A.24})$$

となる。

次に遅延相関関数について計算する。ここからの導出はグリーンウッドによる方法に従う [50]。グリーンウッドの方法は一粒子問題であれば遅延相関関数を温度相関関数から解析接続を経由し求める方法 [2, 44] より簡便である。不純物ポテンシャルを含む一粒子ハミルトニアン $H_0 + V$ に対するエネルギー固有状態を $|\alpha\rangle$, エネルギー固有値を E_α とすると、遅延相関関数は

$$\Phi_{xx}(\omega) = 2e^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f(E_\alpha) - f(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\delta} \langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | j_x | \alpha \rangle \quad (\text{A.25})$$

となる。ただしスピン縮重度を考慮して 2 倍した。ここで

$$\frac{1}{E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\delta} - \frac{1}{E_\alpha - E_{\alpha'}} = \frac{-\hbar\omega - i\delta}{(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\delta)(E_\alpha - E_{\alpha'})} \quad (\text{A.26})$$

という関係に注目すれば,

$$\Phi_{xx}(\omega) = \Phi_{xx}(0) + 2\pi i\omega e^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f(E_\alpha) - f(E_{\alpha'})}{(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\delta)(E_\alpha - E_{\alpha'})} \langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | j_x | \alpha \rangle \quad (\text{A.27})$$

となる。したがって

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\omega) &= 2\hbar e^2 \sum_{\alpha, \alpha'} |\langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle|^2 \frac{f(E_\alpha) - f(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \delta(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega) \\ &= 2\hbar e^2 \sum_{\alpha, \alpha'} |\langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle|^2 \frac{f(E_{\alpha'} - \hbar\omega) - f(E_{\alpha'})}{E_{\alpha'} - \hbar\omega - E_{\alpha'}} \delta(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega) \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

$\omega \rightarrow 0$ を取ると,

$$\sigma_{xx}(0) = \frac{2\hbar e^2}{m^2} \sum_{\alpha, \alpha'} |\langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle|^2 \frac{df(E_{\alpha'})}{dE_{\alpha'}} \delta(E_\alpha - E_{\alpha'}) \quad (\text{A.29})$$

$$= \frac{2\hbar e^2}{m^2} \int dE \sum_{\alpha, \alpha'} |\langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle|^2 \frac{df(E)}{dE} \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_{\alpha'}) \quad (\text{A.30})$$

$$= \frac{2\hbar e^2}{m^2} \int dE \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{df(E)}{dE} \delta(E - E_\alpha) \langle \alpha | j_x | \alpha' \rangle \delta(E - E_{\alpha'}) \langle \alpha' | j_x | \alpha \rangle \quad (\text{A.31})$$

$$= \frac{2\hbar e^2}{m^2} \int dE \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{df(E)}{dE} \langle \alpha | \delta(E - H_0 - V) j_x \delta(E - H_0 - V) | \alpha' \rangle \langle \alpha' | j_x | \alpha \rangle \quad (\text{A.32})$$

$$= \frac{2\hbar e^2}{m^2} \int dE \frac{df(E)}{dE} \text{Tr} [\delta(E - H_0 - V) j_x \delta(E - H_0 - V) j_x] \quad (\text{A.33})$$

ここで

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{x - i\delta} - \frac{1}{x + i\delta} \right) \quad (\text{A.34})$$

という関係を用いると,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(0) &= \frac{\hbar e^2}{2\pi m^2} \int dE \frac{df(E)}{dE} \text{Tr} \left[\left(\frac{1}{E - H_0 - V - i\delta} - \frac{1}{E - H_0 - V + i\delta} \right) j_x \right. \\ &\quad \times \left. \left(\frac{1}{E - H_0 - V - i\delta} - \frac{1}{E - H_0 - V + i\delta} \right) j_x \right] \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

となる．波数表示の一粒子グリーン関数，

$$G^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{1}{E - H_0 - V \pm i\delta} \right| \mathbf{k}' \right\rangle \quad (\text{A.36})$$

を用いれば絶対零度における電気伝導度は，

$$\sigma_{xx} = \frac{\hbar e^2}{\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\hbar^2}{m^2} k_x k'_x \langle G^{\text{R}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) G^{\text{A}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E_F) \rangle_{\text{imp}} \quad (\text{A.37})$$

となる．ただしここで， $G^{\text{R}}G^{\text{R}}$ ， $G^{\text{A}}G^{\text{A}}$ は複素平面の上半面，もしくは下半面に極が偏っているため，積分によってゼロになることを用いた．絶対零度かつ良い金属が保たれているような輸送係数の計算ではこの式を起点として考えてゆくのが便利である．

付録 B 第 4 章の Γ の成分

Γ の成分について, (m, n, m', n') の表示と多重項の基底での表示の対応を記す. 対角成分は,

$$(m, n, m', n') = (1, 1, 1, 1) \leftrightarrow (1, 1) \text{ 成分}$$

$$\Gamma_{11}^{11} = \langle c \uparrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow c \uparrow \rangle \quad (\text{B.1})$$

$$(m, n, m', n') = (1, 1, 2, 2) \leftrightarrow (2, 2) \text{ 成分}$$

$$\Gamma_{22}^{11} = \langle c \uparrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow c \downarrow \rangle \quad (\text{B.2})$$

$$(m, n, m', n') = (1, 1, 3, 3) \leftrightarrow (3, 3) \text{ 成分}$$

$$\Gamma_{33}^{11} = \langle c \uparrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow v \uparrow \rangle \quad (\text{B.3})$$

$$(m, n, m', n') = (1, 1, 4, 4) \leftrightarrow (4, 4) \text{ 成分}$$

$$\Gamma_{44}^{11} = \langle c \uparrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow v \downarrow \rangle \quad (\text{B.4})$$

$$(m, n, m', n') = (2, 2, 1, 1) \leftrightarrow (5, 5) \text{ 成分}$$

$$\Gamma_{11}^{22} = \langle c \downarrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow c \uparrow \rangle \quad (\text{B.5})$$

$$(m, n, m', n') = (2, 2, 2, 2) \leftrightarrow (6, 6) \text{ 成分}$$

$$\Gamma_{22}^{22} = \langle c \downarrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow c \downarrow \rangle \quad (\text{B.6})$$

$(m, n, m', n') = (2, 2, 3, 3) \leftrightarrow (7, 7)$ 成分

$$\Gamma_{33}^{22} = \langle c \downarrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow v \uparrow \rangle \quad (\text{B.7})$$

$(m, n, m', n') = (2, 2, 4, 4) \leftrightarrow (8, 8)$ 成分

$$\Gamma_{44}^{22} = \langle c \downarrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow v \downarrow \rangle \quad (\text{B.8})$$

$(m, n, m', n') = (3, 3, 1, 1) \leftrightarrow (9, 9)$ 成分

$$\Gamma_{11}^{33} = \langle v \uparrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow c \uparrow \rangle \quad (\text{B.9})$$

$(m, n, m', n') = (3, 3, 2, 2) \leftrightarrow (10, 10)$ 成分

$$\Gamma_{22}^{33} = \langle v \uparrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow c \downarrow \rangle \quad (\text{B.10})$$

$(m, n, m', n') = (3, 3, 3, 3) \leftrightarrow (11, 11)$ 成分

$$\Gamma_{33}^{33} = \langle v \uparrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow v \uparrow \rangle \quad (\text{B.11})$$

$(m, n, m', n') = (3, 3, 4, 4) \leftrightarrow (12, 12)$ 成分

$$\Gamma_{44}^{33} = \langle v \uparrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow v \downarrow \rangle \quad (\text{B.12})$$

$(m, n, m', n') = (4, 4, 1, 1) \leftrightarrow (13, 13)$ 成分

$$\Gamma_{11}^{44} = \langle v \downarrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow c \uparrow \rangle \quad (\text{B.13})$$

$(m, n, m', n') = (4, 4, 2, 2) \leftrightarrow (14, 14)$ 成分

$$\Gamma_{22}^{44} = \langle v \downarrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow c \downarrow \rangle \quad (\text{B.14})$$

$(m, n, m', n') = (4, 4, 3, 3) \leftrightarrow (15, 15)$ 成分

$$\Gamma_{33}^{44} = \langle v \downarrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow v \uparrow \rangle \quad (\text{B.15})$$

$(m, n, m', n') = (4, 4, 4, 4) \leftrightarrow (16, 16)$ 成分

$$\Gamma_{44}^{44} = \langle v \downarrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow v \downarrow \rangle \quad (\text{B.16})$$

非対角成分は以下のようになる.

$(m, n, m', n') = (1, 4, 2, 3) \leftrightarrow (2, 15)$ 成分

$$\Gamma_{23}^{14} = \langle v \downarrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow c \downarrow \rangle \quad (\text{B.17})$$

$(m, n, m', n') = (1, 4, 4, 1) \leftrightarrow (4, 13)$ 成分

$$\Gamma_{41}^{14} = \langle v \downarrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | c \uparrow v \downarrow \rangle \quad (\text{B.18})$$

$(m, n, m', n') = (2, 3, 1, 4) \leftrightarrow (5, 12)$ 成分

$$\Gamma_{14}^{23} = \langle v \uparrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow c \uparrow \rangle \quad (\text{B.19})$$

$(m, n, m', n') = (2, 3, 3, 2) \leftrightarrow (7, 10)$ 成分

$$\Gamma_{32}^{23} = \langle v \uparrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | c \downarrow v \uparrow \rangle \quad (\text{B.20})$$

$(m, n, m', n') = (3, 2, 2, 3) \leftrightarrow (10, 7)$ 成分

$$\Gamma_{23}^{32} = \langle c \downarrow v \uparrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow c \downarrow \rangle \quad (\text{B.21})$$

$(m, n, m', n') = (3, 2, 4, 1) \leftrightarrow (12, 5)$ 成分

$$\Gamma_{41}^{32} = \langle c \downarrow c \uparrow | \hat{\Gamma} | v \uparrow v \downarrow \rangle \quad (\text{B.22})$$

$(m, n, m', n') = (4, 1, 1, 4) \leftrightarrow (13, 4)$ 成分

$$\Gamma_{14}^{41} = \langle c \uparrow v \downarrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow c \uparrow \rangle \quad (\text{B.23})$$

$(m, n, m', n') = (4, 1, 3, 2) \leftrightarrow (15, 2)$ 成分

$$\Gamma_{32}^{41} = \langle c \uparrow c \downarrow | \hat{\Gamma} | v \downarrow v \uparrow \rangle \quad (\text{B.24})$$

謝辞

まず何より、伏屋雄紀准教授に格別の感謝を申し上げます。右も左も分からない私に、理論物理学研究の進め方、論文の書き方、そして研究者としてのあり方を、ときには優しく、ときには厳しく教えてくださりました。学部4年からの6年間、数多くのご迷惑とご心配をおかけしました。論文執筆の際にはお忙しいところ、多くの時間を割いていただきました。そのような何かと手がかかる私を辛抱強く、最後まで懇切丁寧に指導していただきました。心より深く、深く感謝申し上げます。

本博士論文の審査を担当してくださった大淵泰司准教授、尾関之康教授、小久保伸人准教授、中村淳教授に感謝申し上げます。大淵泰司准教授におかれましては、副指導教員として私のことを気にかけて下さったことや、メタマテリアルに関するの最近の進展について教えてくださったことが思い起こされます。ありがとうございました。尾関之康教授におかれましては、学部や大学院の授業でお世話になりました。大学院の統計力学の授業はこれまで受講した全講義の中で一番面白かった記憶が残っています。ありがとうございました。小久保伸人准教授におかれましては、よく声をかけてくださり世間話などをしていただきました。ありがとうございました。中村淳教授におかれましてはお忙しい中、何度か研究の話や相談ごとに乗ってくださりました。ありがとうございました。

京都大学の白石誠司教授におかれましては、実験データを提供していただいたり議論をしていただきました。心より感謝申し上げます。シンガポール国立大学の Shaffique Adam 准教授に感謝申し上げます。私をリサーチインターンシッププログラムの研究生として受け入れていただき、充実した研究活動を行わせていただきました。また興味深い論文を多く教えていただきました。シンガポール国立大学の関係者のみなさまにも感謝申し上げます。その中で特に Girish Sharma 氏に感謝申し上げます。私の拙く要領の得ない英語にも関わらず、頻繁に議論をしていただきました。ありがとうございました。

電気通信大学共通教育部の小林 哲特任教授におかれましては、海外渡航が初めてである私に様々なアドバイスをしていただきインターンシップの手配をしてくださりました。ありがとうございました。電気通信大学基盤理工学部の先生方には、これまで学部から大学院まで講義を通して大変お世話になりました。大学院に上がってから私のことを気にかけてくださり大変ありがたく思います。

伏屋研究室のみなさまに感謝申し上げます。新井隼人氏には私が学部4年のときに物理の取り組み方、プログラムの書き方を教えてくださりました。物理に対する直感的な理解の仕

方は私の中の基礎を成しております。同期の中井純平氏、渡部太平氏の両氏には、キッテル固体量子論、および AGD 輪講で特にお世話になりました。あのときの学びは本博士論文の随所に生かされています。大和田光明氏、および猪崎優喜氏の両氏には、同じ研究室の博士課程のそれぞれ先輩、後輩として多くの場面で助けられました。河村省吾氏、山田暉馨氏には物理、数学に関することをよく教えてもらい、よく勉強させていただきました。皆様本当にありがとうございました。他研究室の皆様との交流にも恵まれました。森下研究室の大古田駿氏には、量子力学や数値計算手法について多くのことを学ばせていただきました。研究における妥協を許さない姿勢にはいつも勇気付けられました。松林研究室の有馬寛人氏、元山史都氏、小久保研究室の織田健介氏、清水研究室の佐久間翔平氏、森下研究室の鈴木優士郎氏には、よく飲み会に誘っていただくなど大変お世話になりました。日々楽しく、稔りある博士課程を送ることができたのはみなさまのおかげです。ありがとうございました。

数多くの方々に支えてもらったことで今の自分があります。本当にありがとうございました。最後にここまで育てていただき博士課程の進学を許してくれた両親に心より感謝を申し上げます。

関連論文の印刷公表の方法および時期

論 文 (第 3 章)

全著者名: Hiroshi Hayasaka and Yuki Fuseya

論文題目 「Weak anti-localization in spin-orbit coupled lattice systems」

Journal of Physics: Condensed Matter **32**, 16LT01 (2020)

参 考 論 文 (第 2 章の一部)

全著者名: Hiroshi Hayasaka and Yuki Fuseya

論文題目 「Crystalline spin-orbit interaction and Zeeman splitting in $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ 」

Journal of Physics: Condensed Matter **28**, 31LT01 (2016)

参考文献

- [1] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673–676 (1979).
- [2] A. A. Abrikosov, I. Dzyaloshinskii, L. P. Gorkov, and R. A. Silverman, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Dover New York, NY (1975).
- [3] M. Aitani, T. Hirahara, S. Ichinokura, M. Hanaduka, D. Shin, and S. Hasegawa, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 206802 (2014).
- [4] K. Akiba, A. Miyake, H. Sakai, K. Katayama, H. Murakawa, N. Hanasaki, S. Takaoka, Y. Nakanishi, M. Yoshizawa, and M. Tokunaga, *Phys. Rev. B* **98**, 115144 (2018).
- [5] R. Akiyama, K. Fujisawa, T. Yamaguchi, R. Ishikawa, and S. Kuroda, *Nano Research* **9**(2), 490–498 (2016).
- [6] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge books online. Cambridge University Press (2010).
- [7] A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. B* **55**, 1142–1161 (1997).
- [8] B. L. Altshuler, D. Khmel'nitzkii, A. I. Larkin, and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **22**, 5142–5153 (1980).
- [9] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492–1505 (1958).
- [10] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**(8), 2857–2862 (1998).
- [11] Y. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**(10), 102001 (2013).
- [12] B. A. Assaf, T. Cardinal, P. Wei, F. Katmis, J. S. Moodera, and D. Heiman, *Appl. Phys. Lett.* **102**(1), 012102 (2013).
- [13] G. Bergman, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1046–1049 (1982).
- [14] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **392**(1802), 45–57 (1984).
- [15] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, *Sov. JETP* **42**, 705 (1976).
- [16] J. R. Burke, B. Houston, and H. T. Savage, *Phys. Rev. B* **2**, 1977–1988 (1970).
- [17] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C Solid State Phys.* **17**(33), 6039–6045

- (1984).
- [18] T. Chattopadhyay, H. von Schnering, W. Grosshans, and W. Holzapfel, *Physica B+C* **139-140**, 356 – 360 (1986).
 - [19] J. Chen, X. Y. He, K. H. Wu, Z. Q. Ji, L. Lu, J. R. Shi, J. H. Smet, and Y. Q. Li, *Phys. Rev. B* **83**, 241304 (2011).
 - [20] J. Chen, H. J. Qin, F. Yang, J. Liu, T. Guan, F. M. Qu, G. H. Zhang, J. R. Shi, X. C. Xie, C. L. Yang, K. H. Wu, Y. Q. Li, and L. Lu, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 176602 (2010).
 - [21] M. H. Cohen and E. I. Blount, *Phil. Mag.* **5**(50), 115–126 (1960).
 - [22] P. Deorani, J. Son, K. Banerjee, N. Koirala, M. Brahlek, S. Oh, and H. Yang, *Phys. Rev. B* **90**, 094403 (2014).
 - [23] J. O. Dimmock, I. Melngailis, and A. J. Strauss, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 1193–1196 (1966).
 - [24] P. A. M. Dirac and R. H. Fowler, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **117**(778), 610–624 (1928).
 - [25] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580–586 (1955).
 - [26] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, *Phys. Rev.* **98**, 368–384 (1955).
 - [27] M. I. D'yakonov and V. I. Perel, *JETP. Lett.* **13** (1971).
 - [28] M. I. D'yakonov and V. I. Perel, *Sov. Phys. JETP* **33**(5), 1053–1059 (1971).
 - [29] M. I. D'yakonov and V. I. Perel, *Sov. Phys. JETP* **38**(1), 177–183 (1974).
 - [30] F. J. Dyson, *J. Math. Phys.* **3**(6), 1191–1198 (1962).
 - [31] P. Dziawa, B. J. Kowalski, K. Dybko, R. Buczko, A. Szczerbakow, M. Szot, E. Lusakowska, T. Balasubramanian, B. M. Wojek, M. H. Berntsen, O. Tjernberg, and T. Story, *Nat. Mater* **11**, 1023 EP – (2012).
 - [32] A. Efros and M. Pollak, *Electron-electron interactions in disordered systems*, Modern Problems in Condensed Matter Sciences. Elsevier Burlington, MA (1985).
 - [33] R. J. Elliott, *Phys. Rev.* **96**, 266–279 (1954).
 - [34] H. Emoto, Y. Ando, E. Shikoh, Y. Fuseya, T. Shinjo, and M. Shiraishi, *J. Appl. Phys.* **115**(17), 17C507 (2014).
 - [35] H. Emoto, Y. Ando, G. Eguchi, R. Ohshima, E. Shikoh, Y. Fuseya, T. Shinjo, and M. Shiraishi, *Phys. Rev. B* **93**, 174428 (2016).
 - [36] H.-A. Engel, B. I. Halperin, and E. I. Rashba, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 166605 (2005).
 - [37] J. Fan and J. Eom, *Appl. Phys. Lett.* **92**(14), 142101 (2008).

-
- [38] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill Boston (1971).
 - [39] L. L. Foldy and S. A. Wouthuysen, *Phys. Rev.* **78**, 29–36 (1950).
 - [40] B. Fu, H.-W. Wang, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 246601 (2019).
 - [41] L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 106802 (2011).
 - [42] H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **49**(2), 649–651 (1980).
 - [43] H. Fukuyama, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **84**, 47–68 (1985).
 - [44] H. Fukuyama, H. Ebisawa, and Y. Wada, *Prog. Theor. Phys.* **42**(3), 494–511 (1969).
 - [45] H. Fukuyama and R. Kubo, *Journal of the Physical Society of Japan* **28**(3), 570–581 (1970).
 - [46] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**(9), 093704 (2012).
 - [47] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**(1), 012001 (2015).
 - [48] L. Gor’kov, A. I. Larkin, and D. E. Khmel’nitskii, *JETP Lett.* **30**(4), 228 (1979).
 - [49] B. Grbić, R. Leturcq, T. Ihn, K. Ensslin, D. Reuter, and A. D. Wieck, *Phys. Rev. B* **77**, 125312 (2008).
 - [50] D. A. Greenwood, *Proc. Phys. Soc.* **71**(4), 585–596 (1958).
 - [51] G. Grosso and G. Parravicini, *Solid State Physics*, Elsevier Science (2000).
 - [52] H. Hayasaka and Y. Fuseya, *J. Phys: Cond. Mat.* **28**(31), 31LT01 (2016).
 - [53] H. Hayasaka and Y. Fuseya, *J. Phys.: Cond. Mat.* **32**(16), 16LT01 (2020).
 - [54] S. Hikami, A. I. Larkin, and Y. Nagaoka, *Prog. of Theor. Phys.* **63**(2), 707–710 (1980).
 - [55] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1834–1837 (1999).
 - [56] D. Hou, Z. Qiu, K. Harii, Y. Kajiwara, K. Uchida, Y. Fujikawa, H. Nakayama, T. Yoshino, T. An, K. Ando, X. Jin, and E. Saitoh, *Appl. Phys. Lett.* **101**(4), 042403 (2012).
 - [57] T. H. Hsieh, H. Lin, J. Liu, W. Duan, A. Bansil, and L. Fu, *Nat. Commun.* **3**(1), 982 (2012).
 - [58] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323–410 (2004).
 - [59] S. Iordanskii, Y. B. Lyanda-Geller, and G. E. Pikus, *Pis’ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60**(3), 1993–203 (1994).
 - [60] Y. Izaki and Y. Fuseya, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 156403 (2019).
 - [61] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Science* **306**(5703),

- 1910–1913 (2004).
- [62] D. Kim, P. Syers, N. P. Butch, J. Paglione, and M. S. Fuhrer, *Nature Communications* **4**(1), 2040 (2013).
 - [63] A. Kiss, L. Szolnoki, and F. Simon, *Scientific Reports* **6**(1), 22706 (2016).
 - [64] W. Knap, C. Skierbiszewski, A. Zduniak, E. Litwin-Staszewska, D. Bertho, F. Kobbi, J. L. Robert, G. E. Pikus, F. G. Pikus, S. V. Iordanskii, V. Mosser, K. Zekentes, and Y. B. Lyanda-Geller, *Phys. Rev. B* **53**, 3912–3924 (1996).
 - [65] F. Komori, S.-i. Kobayachi, and W. Sasaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **52**(2), 368–371 (1983).
 - [66] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**(6), 570–586 (1957).
 - [67] M. Lach-hab, D. A. Papaconstantopoulos, and M. J. Mehl, *J. Phys. Chem. Solids* **63**(5), 833 – 841 (2002).
 - [68] J. S. Langer and T. Neal, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 984–986 (1966).
 - [69] K.-I. Lee, J. W. Roh, J. Chang, S.-H. Han, K.-H. Shin, W. Y. Jeung, M. Johnson, and W. Lee, *Phys. Rev. B* **79**, 195201 (2009).
 - [70] P. A. Lee and M. G. Payne, *Phys. Rev. B* **5**, 923–931 (1972).
 - [71] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287–337 (1985).
 - [72] C. S. Lent, M. A. Bowen, J. D. Dow, and R. S. Allgaier, *Superlattices and Microstruct.* **2**, 491 (1986).
 - [73] M. Liu, J. Zhang, C.-Z. Chang, Z. Zhang, X. Feng, K. Li, K. He, L.-l. Wang, X. Chen, X. Dai, Z. Fang, Q.-K. Xue, X. Ma, and Y. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 036805 (2012).
 - [74] Y. Liu and R. E. Allen, *Phys. Rev. B* **52**, 1566–1577 (1995).
 - [75] H.-Z. Lu and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. B* **92**, 035203 (2015).
 - [76] H.-Z. Lu, J. Shi, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076801 (2011).
 - [77] H.-Z. Lu, W. Yao, D. Xiao, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 016806 (2013).
 - [78] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102**, 1030–1041 (1956).
 - [79] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869–883 (1955).
 - [80] G. D. Mahan, *Many Particle Physics, Third Edition*, Plenum New York (2000).
 - [81] E. McCann, K. Kechedzhi, V. I. Fal’ko, H. Suzuura, T. Ando, and B. L. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 146805 (2006).
 - [82] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Science* **301**(5638), 1348–1351 (2003).
 - [83] Y. Niimi, D. Wei, H. Idzuchi, T. Wakamura, T. Kato, and Y. Otani, *Phys. Rev.*

-
- Lett.* **110**, 016805 (2013).
- [84] H. Ochoa, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206808 (2012).
 - [85] H. Ochoa, F. Finocchiaro, F. Guinea, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **90**, 235429 (2014).
 - [86] Y. Pei, X. Shi, A. LaLonde, H. Wang, L. Chen, and G. J. Snyder, *Nature* **473**(7345), 66–69 (2011).
 - [87] M. L. Peres, H. S. Monteiro, V. A. Chitta, S. de Castro, U. A. Mengui, P. H. O. Rappl, N. F. Oliveira, E. Abramof, and D. K. Maude, *J. Appl. Phys.* **115**(9), 093704 (2014).
 - [88] G. Pikus, *JETP* **14**(4), 898 (1962).
 - [89] G. Rickayzen, *Green's functions and condensed matter*, Techniques of physics. Academic Press (1980).
 - [90] J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Always learning. Pearson Education, Incorporated (1967).
 - [91] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics; rev. ed.*, Addison-Wesley Reading, MA (1994).
 - [92] J. C. R. Sánchez, L. Vila, G. Desfonds, S. Gambarelli, J. P. Attané, J. M. De Teresa, C. Magén, and A. Fert, *Nat. Commun.* **4**(1), 2944 (2013).
 - [93] W.-Y. Shan, H.-Z. Lu, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. B* **86**, 125303 (2012).
 - [94] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004).
 - [95] H. Sitter, K. Lischka, and H. Heinrich, *Phys. Rev. B* **16**, 680–687 (1977).
 - [96] G. E. Smith, G. A. Baraff, and J. M. Rowell, *Phys. Rev.* **135**, A1118–A1124 (1964).
 - [97] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755–787 (1984).
 - [98] P. J. Stiles, E. Burstein, and D. N. Langenberg, *J. Appl. Phys.* **32**(10), 2174–2178 (1961).
 - [99] A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Onuki, K. Shibutani, and T. Komatsubara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**(4), 1294–1304 (1986).
 - [100] H. Suzuura and T. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 266603 (2002).
 - [101] A. Svane, N. E. Christensen, M. Cardona, A. N. Chantis, M. van Schilfgaarde, and T. Kotani, *Phys. Rev. B* **81**, 245120 (2010).
 - [102] G. Tkachov and E. M. Hankiewicz, *Phys. Rev. B* **84**, 035444 (2011).

- [103] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Nature* **442**(7099), 176–179 (2006).
- [104] X. Wang, X. He, T. Guan, J. Liao, C. Lin, K. Wu, Y. Li, and C. Zeng, *Physica E* **46**, 236 – 240 (2012).
- [105] L. Wehrli, *Phys. Kondens. Materie* **8**, 87 (1968).
- [106] N. Werthamer, *pp 321-70 of Superconductivity. Vols. 1 and 2. Parks, R. D. (ed.). New York, Marcel Dekker, Inc., 1969.*
- [107] M. Willatzen and L. Lew Yan Voon, *The k p Method: Electronic Properties of Semiconductors*, (2009).
- [108] P. Wolff, *J. Phys. Chem. Solids* **25**(10), 1057 – 1068 (1964).
- [109] X. Xi, X.-G. He, F. Guan, Z. Liu, R. D. Zhong, J. A. Schneeloch, T. S. Liu, G. D. Gu, X. Du, Z. Chen, X. G. Hong, W. Ku, and G. L. Carr, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 096401 (2014).
- [110] Y. Yafet, **14**, 1 – 98 (1963).
- [111] X.-Z. Yan and C. S. Ting, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 126801 (2008).
- [112] X.-Z. Yan and C. S. Ting, *New J. Phys.* **11**(9), 093026 (2009).
- [113] Z. Zhu, B. Fauqué, K. Behnia, and Y. Fuseya, *J. Phys.: Cond. Mat.* **30**(31), 313001 (2018).
- [114] Z. Zhu, B. Fauqué, Y. Fuseya, and K. Behnia, *Phys. Rev. B* **84**, 115137 (2011).